

سبحان الله



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گرایش: حالت جامد

بررسی نظری خواص فیزیکی لایه‌های نازک نیمرسانای اکسید فلزی

حلیمه چرامین

استاد راهنما:

دکتر حسین عشقی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

پروردگارا:

نه میتوانم موهایشان را که در راه عزت من سفید شد، سیاه کنم و نه برای دستهای پینه بسته شان که ثمره تلاش برای افتخار من است، مرهمی دارم . پس توفیقم ده که هر لحظه شکر گزارشان باشم و ثانیه های عمرم را در عصای دست بودنشان بگذرانم.

تقدیم به

پدر و مادر دلسوز و مهربانم که زحماتشان با هیچ واژه ای قابل قدردانی نیست. تقدیم به خانواده عزیزم و تمام کسانی که دوستشان دارم. و با تشکر از زحمات استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر حسین عشقی که خودباوری را به من آموختند و صادقانه تجربیات ارزشمندشان را در اختیار من گذاشتند .

تعهد نامه

اینجانب **حلیمه چرامین** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه شاهرود نویسنده پایان نامه **بررسی خواص فیزیکی لایه‌های نازک نیمرسانای اکسید فلزی** تحت راهنمایی جناب آقای دکتر حسین عشقی متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « **Shahrood University of Technology** » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ: ۱۳۹۴/۱۱/۲۱

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

مطالعه خواص الکتریکی نقش مهمی در تحقیقات تجربی و نظری در لایه‌های نازک مواد بشمار می‌آید. وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی یک پارامتر مهم در خواص الکتریکی نمونه‌های لایه نازک است که با بررسی آن می‌توان نه تنها از فرایندهای رسانشی در یک نمونه بلکه جزئیات وابسته به ترازهای ناخالصی شامل موقعیت و تراکم ترازها در داخل گاف نواری ماده اطلاعاتی بدست آورد. در این کار تحقیقاتی به بررسی نظری رسانندگی الکتریکی لایه‌های نازک نیمرساناهای اکسید لانتانیوم استرانسیوم کبالت $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ (LSCO)، اکسید مس (CuO) آلاینش شده با روتینیوم و اکسید روی (ZnO) آلاینش شده با نیکل در قالب دو سازوکار جهش برد متغیر مات (MVRH) و فعال‌سازی گرمایی آرنیوس پرداخته‌ایم.

در نمونه‌های LSCO، معلوم شد که دمای مشخصه مات (T_M) در گستره $2/8 \times 10^5 \text{ K} - 5/0 \times 10^6 \text{ K}$ ، چگالی ترازها در سطح فرمی ($N(E_f)$) در گستره $8/3 \times 10^{44} (\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}) - 2/0 \times 10^{46}$ ، انرژی متوسط جهشی (W_{hop}) $14 \text{ meV} - 77 \text{ meV}$ و فاصله متوسط جهشی (R_{hop}) $1/4 \text{ nm} - 4/0 \text{ nm}$ می‌باشد. در یکی از نمونه‌ها با رسانندگی الکتریکی بیشتر، با به کارگیری سازوکار فعال‌سازی گرمایی مقدار انرژی فعال‌سازی (E_a) در محدوده دمایی مورد بررسی در گستره $8 \text{ meV} - 19 \text{ meV}$ محاسبه شد.

در نمونه‌های $\text{CuO}:\text{Ru}$ ، با استفاده از سازوکار MVRH، T_M در گستره $1/0 \times 10^5 \text{ K} - 1/6 \times 10^6 \text{ K}$ ، $N(E_f)$ در حدود $1/8 \times 10^{47} (\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}) - 9/3 \times 10^{48}$ ، W_{hop} در گستره $29 \text{ meV} - 69 \text{ meV}$ ، R_{hop} $0/3 \text{ nm} - 5/0 \text{ nm}$ و با استفاده از سازوکار فعال‌سازی گرمایی آرنیوس E_a در بازه دمایی مورد مطالعه $72 \text{ meV} - 75 \text{ meV}$ تخمین زده شد.

در نمونه‌های ZnO:Ni، با استفاده از سازوکار MVRH، T_M در گستره $۱۰^۶ \times ۱/۲ - ۱۰^۷ \times ۱/۷$ K، $N(E_f)$ در حدود $۱۰^{۴۲} \times ۶/۰ - ۱۰^{۴۴} \times ۱/۴$ ($J^{-1} \cdot m^{-3}$)، W_{hop} در گستره ۵۱ meV-۱۱۲، R_{hop} در گستره ۵/۷ nm-۱۱/۶ و با استفاده از سازوکار فعال‌سازی گرمایی آرنیوس E_a در بازه دمایی مورد مطالعه ۱۳۵-۲۶۰ meV تخمین زده شد.

کلمات کلیدی: خواص الکتریکی، رسانندگی الکتریکی، لایه نازک نیمرسانا، $La_{0.7}Sr_{0.3}CoO$

ZnO:Ni، CuO:Ru

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه:

۱. چرامین، حلیمه؛ عشقی، حسین، (۱۳۹۴)، «مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک

ZnO آلایش شده با Ni با استفاده از داده های رسانندگی الکتریکی در گستره دمایی ۳۰۰ K-

۴۱۰»، کنفرانس سالانه فیزیک ایران، دانشگاه مشهد، ص ۱۹۶۲-۱۹۶۵.

۲. چرامین، حلیمه؛ عشقی، حسین، (۱۳۹۴)، «مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک

La_{0.7}Sr_{0.3}CoO₃ با استفاده از داده های مقاومت ویژه الکتریکی در گستره دمایی ۷۷ K -

۳۲۰»، کنفرانس سیستم های بس ذره ای، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی تهران، ص

۷۳-۷۶.

فهرست مطالب

فصل اول	۱
۱-۱ مقدمه	۲
۲-۱ دسته بندی مواد	۲
۳-۱ نیم رساناها	۳
۴-۱ بخشنده ها و پذیرنده ها	۶
۵-۱ معرفی سازوکارهای رسانندگی الکتریکی در نیم رساناهای لایه نازک	۹
۱-۵-۱ نظریه ترابری حاملها از طریق جهش برد متغیر مات (MVRH)	۱۰
۱-۵-۲ نظریه ترابری حاملها از طریق فعال سازی گرمایی (TA)	۱۳
فصل دوم	۱۵
۱-۲ مقدمه	۱۶
۲-۲ لایه های نازک اکسید روی	۱۶
۳-۲ لایه های نازک اکسید مس	۱۹
۴-۲ لایه های نازک اکسید استرانسیم لانتانیم کبات	۲۱
۵-۲ مروری بر مقالات	۲۲
۲-۵-۱ رسانندگی الکتریکی در لایه های نازک ZnO	۲۲
۲-۵-۲ رسانندگی الکتریکی در لایه های نازک CuO	۲۹
۳-۵-۲ رسانندگی الکتریکی در لایه های نازک $\text{La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{CoO}_3$	۳۲

فصل سوم	۳۵
۱-۳ مقدمه	۳۶
۲-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ در گستره دمایی K-۷۷	۳۶
۳۲۰	
۳-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک CuO خالص (آلایش نشده) و آلایش شده با Ru	۴۷
با استفاده از داده های مقاومت الکتریکی در گستره دمایی ۳۱۰ K - ۴۳۰ K	
۴-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه ZnO	۵۴
۱-۴-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک ZnO آلایش شده با Ni تهیه شده به روش کندوپاش	۵۴
۲-۴-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک ZnO آلایش شده با % ۵-۰/۵ Ni	
تهیه شده به روش اسپری پائرولیز	۶۰
منابع	۷۰

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱: مورفولوژی وابسته به ساختارهای لایه‌های نازک ZnO ۱۷
- شکل ۲-۱: ساختار شش‌گوشی ورتزایت اکسید روی ۱۸
- شکل ۳-۱: سلول واحد در شبکه بلوری اکسید مس (CuO) [۱۳] ۲۰
- شکل ۴-۱: ساختار هشت وجهی کبالت لاتتانیوم آرایش شده با استرانسیم ۲۲
- شکل ۵-۱: داده‌های تجربی مربوط به اکسید روی تک بلور رشد یافته به روش هیدروترمال ۲۳
- شکل ۶-۱: داده‌های تجربی مربوط به اکسید روی بس بلوری ۲۴
- شکل ۷-۱: الف) داده‌های تجربی مربوط به ZnO آرایش شده با As ۲۷
- شکل ۸-۱: داده‌های تجربی مربوط به اکسید روی آرایش شده با Fe ۲۸
- شکل ۹-۱: داده‌های تجربی مربوط به اکسیدمس با میزان جریان اکسیژن متغیر ۳۰
- شکل ۱۰-۱: داده‌های تجربی مربوط به CuO با دمای بازپخت متغیر از 400°C - 600°C ۳۱
- شکل ۱۱-۱: مقاومت الکتریکی بر حسب دما برای نمونه‌های $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{CoO}_3$ آرایش شده با Fe ۳۲
- شکل ۱۲-۱: وابستگی دمایی مقاومت سطحی در لایه نازک LSCO ۳۳
- شکل ۱-۲: الف) عایق (ب) نیمرسانا و (ج) رسانا ۳
- شکل ۲-۲: ساختار نواری نیمرسانای ذاتی ۴
- شکل ۳-۲: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانای ذاتی ۴
- شکل ۴-۲: نیمرسانای نوع-n ۷
- شکل ۵-۲: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانای نوع-n ۸
- شکل ۶-۲: الف) نیمرسانای نوع-p ۸

- شکل ۷-۲: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانا نوع p- ۹
- شکل ۸-۲: جهش الکترون‌ها در تراز های ناخالصی ۱۱
- شکل ۱-۳: وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در فیلم های نازک LSCO ۳۷
- شکل ۲-۳: تغییرات لگاریتمی ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های S1 و S2 و S3 ۳۸
- شکل ۳-۳: تغییرات دمای مشخصه T_M برای نمونه های S2, S1 و S3 ۳۹
- شکل ۴-۳: تغییرات $W_{hop, Mott}$ و $\frac{R_{hop}}{\zeta}$ بر حسب دما برای نمونه های S1, S2 و S3 ۴۰
- شکل ۵-۳: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ برای نمونه S3 ۴۲
- شکل ۶-۳: وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در فیلم های نازک LSC ۴۲
- شکل ۷-۳: تغییرات لگاریتمی ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه بازپخت شده در دمای $600^\circ C$ ۴۳
- شکل ۸-۳: تغییرات $W_{hop, Mott}$ و $\bar{R}_{hop, Mott} / \zeta$ بر ای نمونه بازپخت شده در دمای $600^\circ C$ ۴۴
- شکل ۹-۳: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ برای نمونه بازپخت شده در دمای $600^\circ C$ ۴۵
- شکل ۱۰-۳: لگاریتم مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در لایه های نازک CuO ۴۸
- شکل ۱۱-۳: تغییرات ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های CuO ۴۹
- شکل ۱۲-۳: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلاش Ru ۴۹
- شکل ۱۳-۳: تغییرات $W_{hop, Mott}$ و $\bar{R}_{hop, Mott} / \zeta$ بر حسب T برای نمونه های CuO ۵۰
- شکل ۱۴-۳: نمودار تغییرات $\ln(\rho)$ بر حسب $1000/T$ در نمونه های برای نمونه های CuO ۵۲
- شکل ۱۵-۳: وابستگی دمایی لگاریتم رسانندگی الکتریکی بر حسب عکس دما در لایه های نازک ZnO خالص و آلاش یافته با Ni ۵۴
- شکل ۱۶-۳: تغییرات $\ln(\sigma)$ بر حسب $T^{1/4}$ برای نمونه های ZnO ۵۶
- شکل ۱۷-۳: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلاش Ni ۵۶

- شکل ۳-۱۸: تغییرات الف) $W_{hop,Mott}$ و $\zeta / R_{hop,Mott}$ بر حسب دما برای نمونه های ZnO ۵۷
- شکل ۳-۱۹: نمودار تغییرات $\ln(\sigma)$ بر حسب $1000/T$ در نمونه های ZnO ۵۹
- شکل ۳-۲۰: تغییرات انرژی فعال سازی بر حسب درصد آلیش Ni ۶۰
- شکل ۳-۲۱: وابستگی دمایی لگاریتم بر حسب عکس دما در لایه های نازک ZnO ۶۱
- شکل ۳-۲۲: تغییرات ρ بر حسب $T^{1/4}$ برای نمونه های ZnO ۶۳
- شکل ۳-۲۳: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلیش Ni ۶۳
- شکل ۳-۲۴: تغییرات $W_{hop,Mott}$ و $\zeta / R_{hop,Mott}$ بر حسب T برای نمونه های ZnO ۶۴
- شکل ۳-۲۵: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ در فیلم های ZnO ۶۶
- شکل ۳-۲۶: تغییرات انرژی فعال سازی فیلم های ZnO بر حسب درصد آلیش Ni ۶۷

فهرست جداول

- جدول ۱-۱: خواص ZnO و رتزایت در دمای اتاق ۱۹
- جدول ۲-۱: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی مربوط به ناحیه دمایی بالا و پایین ۲۳
- جدول ۳-۱: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی مربوط به ناحیه دمایی ۱ و ۲ و ۳ ۲۴
- جدول ۴-۱: مقادیر دمای مشخصه T_M ، چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، نسبت فاصله متوسط جهش ها به طول جایگزیده R/ζ و W انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات ۲۵
- جدول ۵-۱: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی برای نمونه های A، B، و C ۲۶
- جدول ۶-۱: مقادیر چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R و W انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات ۲۶
- جدول ۷-۱: مقادیر چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R و W انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات ۲۸
- جدول ۸-۱: مقادیر دمای مشخصه T_0 ، چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R_{hop} و W_{hop} انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات ۳۰
- جدول ۱-۳: مقدار $W_{hop,Mott}$ ، $R_{hop,Mott}$ ، T_M ، $N(E_F)$ در نمونه های مورد بررسی LSCO ۴۱
- جدول ۲-۳: مقادیر $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، T_M و $N(E_F)$ در نمونه های CuO آلاینش شده Ru ۵۱
- جدول ۳-۳: مقادیر $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، T_M و $N(E_F)$ ، در گستره دمایی داده های گزارش شده در نمونه های ZnO:Ni تهیه شده به روش کندوپاش ۵۸
- جدول ۴-۳: مقادیر $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، T_M و $N(E_F)$ ، در گستره دمایی داده های گزارش شده در نمونه های ZnO:N تهیه شده به روش اسپری پایرولیز ۶۵

فصل اول .

مبانی نظری

۱-۱ مقدمه

در این فصل در بخش ۲-۲ دسته بندی مواد شرح داده شده است، در بخش ۳-۲ به بررسی مواد نیمه رسانا پرداخته ایم، در بخش ۴-۲ بخشنده ها و پذیرنده ها توضیح داده شده است، در بخش ۵-۲ سازوکارهای رسانندگی الکتریکی در نیمرساناهای لایه نازک را معرفی و شرح خواهیم داد.

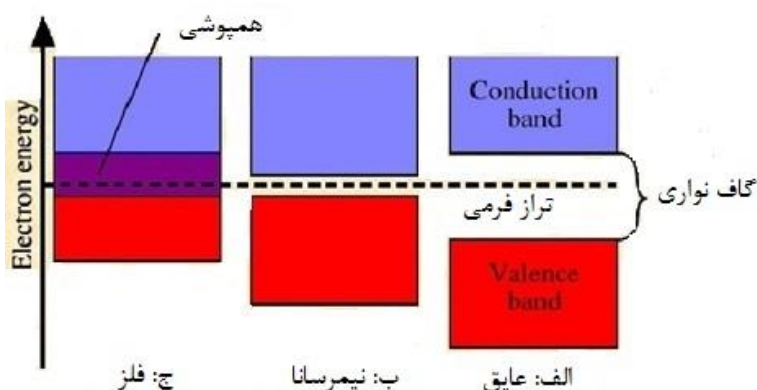
۲-۱ دسته بندی مواد

مواد بلورین از نظر رسانندگی الکتریکی در حالت کلی به سه دسته رسانا، نیمرسانا و عایق تقسیم بندی می شوند. آنچه که این سه دسته از مواد را از هم متمایز می سازد نحوه قرارگیری نوارهای انرژی و گاف نواری مابین آنهاست که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است. در عایق ها، الکترون ها در نوار ظرفیت به وسیله یک گاف انرژی نسبتاً بزرگ (در حدود 5 eV) از نوار رسانش جدا شده اند. در رساناها مانند فلزات نوار ظرفیت با نوار رسانش همپوشانی داشته و بدان معنی است که گاف انرژی وجود ندارد و در نیمرساناها یک شکاف نسبتاً باریک در گستره 0.3 eV بین نوار ظرفیت و نوار رسانش وجود دارد.

در رساناها در دمای صفر کلوین ($T=0\text{ K}$)، تمام ترازهای انرژی در نوار رسانش تا تراز انرژی فرمی توسط الکترون ها اشغال بوده و با اعمال یک میدان الکتریکی کوچک رسانندگی الکتریکی امکانپذیر می باشد. در دماهای بالاتر از صفر کلوین، الکترون ها در حوالی تراز فرمی به صورت گرمایی برانگیخته شده و از زیر تراز فرمی به انرژی های بالای انرژی فرمی منتقل می شوند.

در عایق ها به علت بزرگی گاف انرژی بین نوار رسانش و نوار ظرفیت در دماهای بالا امکان گذار الکترونی از نوار ظرفیت به نوار رسانش بسیار کم محتمل بوده و در نتیجه چگالی حامل های آزاد بسیار ناچیز خواهد بود.

در نیمرساناها، در دمای صفر کلوین، نوار ظرفیت با الکترون پر است و نوار رسانش، خالی است لکن در دمای بالاتر از صفر کلوین و به علت کوچکتر بودن گاف نواری در این مواد در مقایسه با عایق‌ها، الکترون‌ها می‌توانند به صورت گرمایی برانگیخته شده و از نوار ظرفیت به نوار رسانش بروند. این برانگیختگی‌ها می‌توانند منجر به ایجاد تراکمی از الکترون‌های آزاد در نوار رسانش و حفره‌های آزاد در نوار ظرفیت شده و موجب رسانندگی الکتریکی قابل اندازه‌گیری در این مواد شود [۱، ۲ و ۳].



شکل ۱-۱: (الف) عایق (ب) نیمرسانا و (ج) رسانا [۱ و ۲].

۳-۱ نیمرساناها

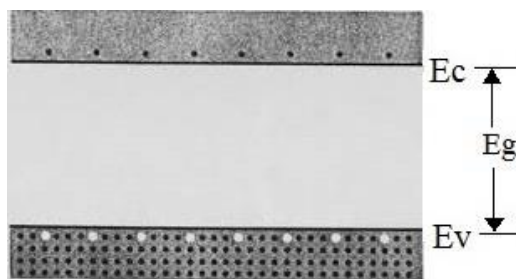
همانطور که در بالا به آن اشاره شد در رساناها همپوشی نوار ظرفیت و نوار رسانش باعث می‌شود که رسانش در هر دمایی صورت بگیرد و این ویژگی باعث می‌شود تا کنترل رسانندگی در این مواد آسان نباشد. در مقابل مواد نیمرسانا رسانندگی الکتریکی را می‌توان از طرق گوناگون از جمله آرایش، تابش نور، ابعاد و ... تغییر داد. این ویژگی منجر به استفاده بیشتر از نیمرساناها به جای رساناها در صنعت قطعات الکترونیک و اپتوالکترونیک شده است.

نیمرسانها را می توان به دو دسته نیمرسانهای ذاتی و نیمرسانهای غیرذاتی (آلایش نشده)

تقسیم بندی کرد.

نیمرسانای ذاتی: به نیمرساناهایی گفته می شود که ناخالصی نداشته باشند. در نیمرسانهای ذاتی

تعداد الکترون های موجود در نوار رسانش با تعداد حفره های موجود در نوار ظرفیت با هم برابرند.

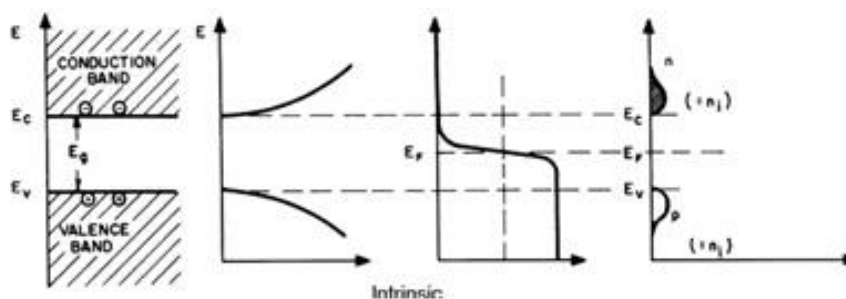


شکل ۱-۲: ساختار نواری نیمرسانای ذاتی [۳].

تراز فرمی باید در موقعیتی قرار بگیرد که حول آن تقارن تراکم حامل ها وجود داشته باشد. به دلیل

برابر بودن تراکم الکترون ها و حفره ها در یک نیمرسانای ذاتی، موقعیت تراز فرمی در وسط گاف

نواری قرار می گیرد که در شکل ۱-۳ نشان داده شده است.



شکل ۱-۳: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانای ذاتی [۳].

با افزایش دما می‌توان تعداد حامل‌های بار الکتریکی و در نتیجه رسانایی الکتریکی را در مواد

نیمرسانای ذاتی افزایش داد. چگالی الکترون‌ها در نیمرسانای ذاتی از رابطه زیر بدست می‌آید: [۳و۴]

$$n = \int_{Ec}^{\infty} n(E) dE = \int_{Ec}^{\infty} N(E) F(E) dE \quad (۱-۱)$$

که در آن $N(E)$ چگالی حالت‌های مجاز انرژی در واحد حجم و $F(E)$ احتمال اشغال یک حالت الکترونی با انرژی E توسط الکترون می‌باشد. همانطور که قبلاً ذکر شد برای نیمرسانای ذاتی، تعداد الکترون‌ها در واحد حجم نوار رسانش برابر با تعداد حفره‌ها در واحد حجم نوار ظرفیت است، یعنی $n=p=n_i$ که در آن n_i تراکم (چگالی) حامل‌های ذاتی است. تراکم حامل‌های ذاتی به گاف انرژی، دما و نیز به جزئیات مربوط به جرم در لبه نوارهای انرژی بستگی دارد. حامل‌های ذاتی اغلب عامل محدودکننده‌ای برای کار در دماهای بالا هستند [۴]. تراکم حامل‌های ذاتی از رابطه زیر موسوم به قانون اثر جرم^۱ بدست می‌آید که در شرایط تعادل گرمایی هم برای نیمرسانای ذاتی و هم نیمرسانای غیرذاتی معتبر است [۳و۴]:

$$np = n_i^2 \quad (۲-۱)$$

و یا

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left[-\frac{E_g}{kT} \right] \quad (۳-۱)$$

و

¹ Mass-action Law

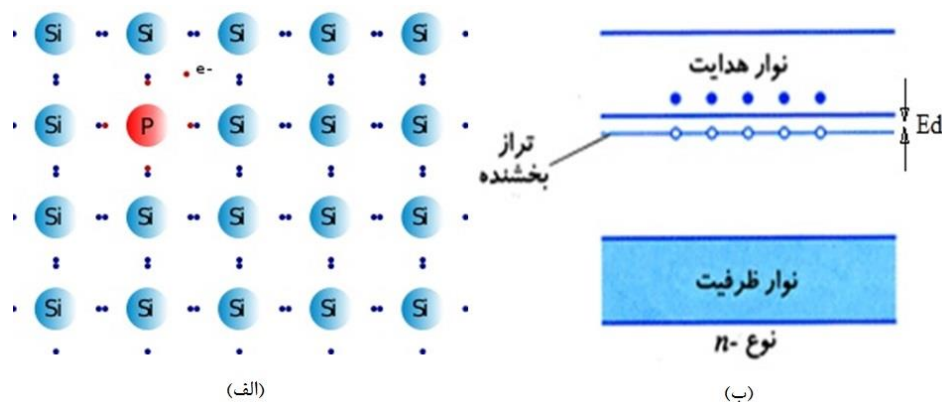
$$n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp \left[-\frac{E_g}{2kT} \right] \quad (4-1)$$

که در آن $E_g \equiv (E_C - E_V)$ است.

نیمرسانای غیرذاتی: با اضافه کردن مقدار کمی ناخالصی به ماده‌ی نیمرسانا می‌توان چگالی حامل‌های بار الکتریکی را به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش داد. منظور از ناخالصی، حضور اتم‌های متفاوت با اتم‌های میزبان در ماده نیمرساناست. با اضافه شدن ناخالصی به نیمرسانا، مقاومت ویژه‌ی الکتریکی ماده کاهش یافته و به عبارت دیگر رسانایی الکتریکی آن به صورت قابل توجهی افزایش می‌یابد. این ناخالصی‌ها، می‌توانند در دو نقش بخشنده الکترون یا پذیرنده الکترون در ماده ایفای نقش کنند. یک نیمرسانا که با ناخالصی بخشنده آرایش شود نیمرسانای نوع-n و اگر با ناخالصی پذیرنده آرایش شود نیمرسانا نوع-p نامیده می‌شود.

۴-۱ بخشنده‌ها و پذیرنده‌ها

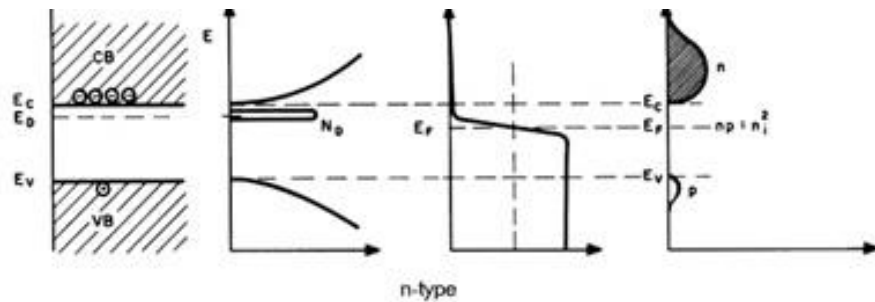
نیمرسانا نوع-n با اضافه کردن ناخالصی بخشنده مانند As (آرسنیک)، Pb (آنتیموان) و یا P (فسفر) به یک نیمرسانای ذاتی نظیر Si تولید می‌شود. در این مورد هر اتم بخشنده دارای پنج الکترون در لایه ظرفیت خود بوده و وقتی اتم بخشنده جایگزین یک اتم در شبکه بلوری می‌شود تنها چهار الکترون ظرفیت با اتم‌های اطراف به اشتراک گذاشته می‌شود و الکترون پنجم ظرفیت در صفر کلون با پیوند ضعیفی به اتم وابسته خود باقی می‌ماند (شکل ۴-۱ الف). در صورت بالا رفتن دما این الکترون از اتم مادر خود جدا شده و می‌تواند آزادانه در داخل بلور حرکت کند. موقعیت انرژی بستگی این الکترون در داخل گاف نواری در نزدیکی لبه نوار رسانش در نظر گرفته می‌شود (شکل ۴-۱ ب).



شکل ۱-۴: (الف) نیمرسانای سیلیسیم که با فسفر به عنوان ناخالصی بخشنده آرایش شده و به نیمرسانای نوع-n تبدیل شده است و (ب) ساختار نواری در این نیمرسانا [۱، ۲ و ۳].

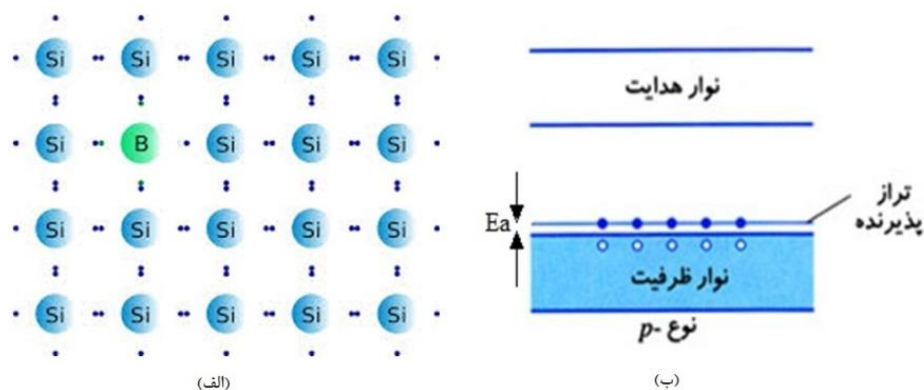
تعداد الکترون‌های آزاد توسط بخشنده‌ها بسیار بیشتر از تعداد الکترون‌های آزاد و حفره‌ها در نیمرسانا ذاتی است که این امر باعث می‌شود رسانایی ماده عمدتاً الکترون‌ها با بار منفی حامل اکثریت بوده و در نتیجه ماده به نیمرسانای نوع-n موسوم است.

زوج‌های حفره-الکترون به طور مستمر بر اثر تحریکات گرمایی شبکه در نیمرسانای نوع-n نیز تشکیل می‌شوند. از آنجا که تعداد اتمهای بخشنده الکترونی زیاد هستند و بسیاری از الکترون‌های آزاد با حفره‌ها باز ترکیب می‌شوند این امر باعث کاهش تعداد حفره‌ها در نیمرسانا نوع-n در مقایسه با نیمرسانای ذاتی می‌گردد. در این ماده از آنجا که تعداد الکترون‌ها در نوار رسانش به عنوان حامل‌های اکثریت بیشتر از حفره‌ها در نوار ظرفیت هستند تراز فرمی به لبه نوار رسانش نزدیکتر خواهد بود تا لبه نوار ظرفیت (شکل ۱-۵).



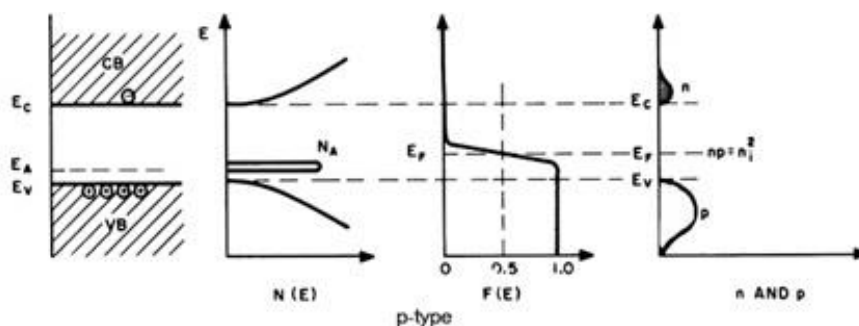
شکل ۱-۵: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانای نوع n- [۳].

نیمرسانای نوع p- با اضافه کردن ناخالصی پذیرنده مانند B (بور)، Ga (گالیم) و یا In (ایندیم) به یک نیمرسانای ذاتی نظیر Si تولید می‌شود. هر اتم پذیرنده دارای سه الکترون در لایه ظرفیت بوده و هنگامی که یک اتم پذیرنده جایگزین یک اتم میزبان در شبکه بلوری می‌شود، تنها سه الکترون ظرفیت با اتم‌های اطراف به اشتراک گذاشته می‌شود که این امر باعث ایجاد یک پیوند ناکامل در شبکه می‌شود (شکل ۱-۶-الف). وجود این پیوند ناکامل به الکترون‌های ظرفیت در اتم‌های مجاور این امکان را می‌دهد که از جایگاه خود بدین جایگاه منتقل شود. حضور این جایگاه خالی به حفره موسوم است.



شکل ۱-۶: (الف) نیمرسانای سیلیسیم که با بور به عنوان ناخالصی آرایش شده و به نیمرسانای نوع p- تبدیل می‌شود و (ب) ساختار نواری در این نیمرسانا [۳، ۱ و ۲].

تعداد حفره ها ایجاد شده توسط پذیرنده بسیار بیشتر از تعداد الکترون های آزاد در نیمرسانای ذاتی است که این امر باعث می شود رسانایی ماده عمدتاً حفره ها با بار مثبت حامل اکثریت بوده و در نتیجه ماده به نیمرسانای نوع-P موسوم است. زوج های حفره-الکترون به طور مستمر بر اثر تحریکات گرمایی شبکه در نیمرسانای نوع-P تشکیل می شوند. از آنجا که تعداد اتمهای پذیرنده الکترونی زیاد هستند و بسیاری از حفره ها با الکترون های آزاد باز ترکیب می شوند این امر باعث کاهش تعداد الکترون ها در نیمرسانا نوع-P در مقایسه با نیمرسانای ذاتی می گردد. در این ماده از آنجا که تعداد حفره ها در نوار ظرفیت به عنوان حامل های اکثریت بیشتر از الکترون ها در نوار رسانش هستند تراز فرمی به لبه نوار ظرفیت نزدیکتر خواهد بود تا لبه نوار رسانش (شکل ۷-۱).



شکل ۷-۱: موقعیت تراز فرمی در نیمرسانا نوع P- [۳].

۵-۱ معرفی سازوکارهای رسانندگی الکتریکی در نیمرساناهای لایه نازک

ما در این بخش به معرفی دو سازوکار رسانندگی الکتریکی جهش برد متغیر مات و فعال سازی

گرمایی در نیمرساناهای لایه نازک پرداخته ایم.

۱-۵-۱ نظریه ترابری حاملها از طریق جهش برد متغیر مات (MVRH)^۱

اساس این نظریه مبتنی بر این واقعیت است که چنانچه حامل های بار به ویژه الکترون های جایگزیده در ترازهای وابسته به ناخالصی ها و یا ناکاملی های بلوری در نزدیکی سطح فرمی از تراکم کافی برخوردار باشند به طوری که حتی در گستره دمایی پایین تابع موج وابسته به آنها با یکدیگر همپوشی داشته باشند (در صورتی که فاصله متوسط بین این ناکاملی های نقطه ای قابل مقایسه با شعاع بوهر مربوط به آن ناکاملی ها باشند) در این صورت رفتار مربوط به این الکترون ها در شرایط حضور میدان الکتریکی، بدون نیاز به برانگیختگی به نوار رسانش، می توانند در همان ترازهای جایگزیده به صورت جهشی عمل رسانندگی الکتریکی و یا به بیانی دیگر انتقال از یک حالت الکترونی به حالتی دیگر را انجام دهند.

از نظر فیزیکی اندازه گیری و تحلیل داده های مربوط به تغییرات دمایی مقاومت ویژه $\rho(T)$ مواد می تواند اطلاعات مفیدی از سازوکار های ترابری حامل ها، همچنین میزان ناخالصی و توزیع ترازهای وابسته از نظر انرژی را در اختیار ما قرار دهد. در گستره دمایی پایین غالباً فرایند رسانش جهشی وابسته به تحرک حامل ها بین ترازهای جایگزیده وابسته به ترازهای ناکاملی های بلوری و نیز اتمهای ناخالصی در داخل گاف نواری سازوکار غالب می باشد. سازوکار رسانش MVRH وابسته به الکترون هایی است که بین ترازهایی که در مجاورت تراز فرمی قرار دارد جهش می کنند (شکل ۸-۱). مقاومت ویژه الکتریکی لایه وابسته به این فرآیند از رابطه زیر حاصل می شود [۵-۱۲]:

$$\rho_M(T) = \rho_{M0} \exp(T_M / T)^{1/n} \quad (۵-۱)$$

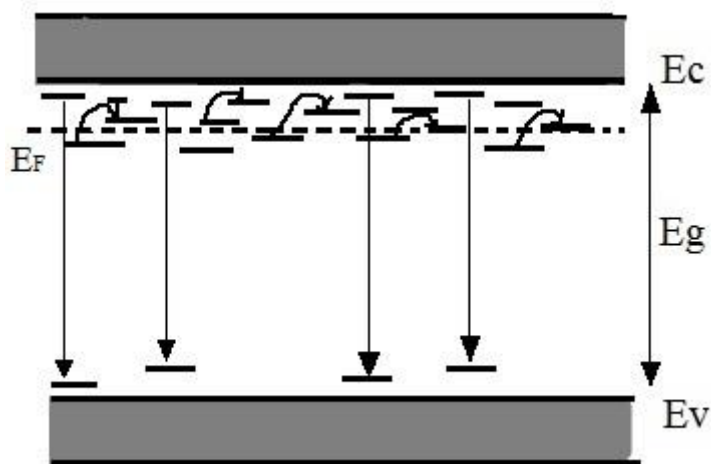
^۱ Mott - Variable Range Hopping

در مدل MVRH مقدار n برابر ۴ و ρ_{M0} و T_M ضرایب ثابت و مستقل از دما هستند. در گزارش رامبو و همکاران [۹] بستگی دمایی ضعیف ρ_{M0} به صورت رابطه زیر ارائه شده است:

$$\rho_{M0} = \frac{(8\pi)^{1/2}}{3e^2 v_p} \left(\frac{N(E_F)}{\alpha k_B T} \right)^{-1/2} \quad (۶-۱)$$

که در رابطه بالا v_p بسامد فونون، $N(E_F)$ چگالی ترازها در سطح فرمی و α معکوس طول جایگزیدگی $(\zeta/1)$ می باشد.

برای بدست آوردن T_M می توان از شیب نمودار $\ln(\rho)$ بر حسب $T^{-1/4}$ استفاده کرد.



شکل ۸-۱: جهش الکترون ها در تراز های ناخالصی .

در این فرایند فاصله جهش ها ثابت نیست و تابع دما می باشد. میانگین این کمیت از روابط معادل

زیر به صورت [۷]

$$\bar{R}_{hop,Mott} = \left(\frac{3.\zeta}{8} \right) \cdot \left(\frac{T_M}{T} \right)^{1/4} \quad (Y-1)$$

و یا [۸ و ۹]

$$\bar{R}_{hop,Mott} = \left[\frac{9}{8\pi\alpha k_B T N(E_F)} \right]^{1/4} \quad (A-1)$$

بدست می‌آید. در این روابط ζ طول جایگزیدگی یا همان شعاع بوهر ($a_B^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2 / m^* e^2$) ($1/\zeta$) می‌باشد. با مشخص شدن دمای مشخصه T_M می‌توان از رابطه زیر چگالی ترازها را در سطح فرمی $N(E_F)$ (با یکای $J^{-1}m^{-3}$) بدست آورد [۷، ۱۰، ۱۱ و ۱۲]:

$$T_M = \left(\frac{18}{k_B . \zeta^3 . N(E_F)} \right) \quad (9-1)$$

در این فرایند میانگین انرژی جهش‌ها از معادلات هم ارز زیر به صورت [۷]:

$$\bar{W}_{hop,Mott} = (k_B T / 4)(T_M / T)^{1/4} \quad (10-1)$$

و یا [۸ و ۹]:

$$\bar{W}_{hop,Mott} = \left(\frac{3}{4\pi R^3 N(E_F)} \right) \quad (11-1)$$

بدست می‌آید. لازم به ذکر آنکه شرط استفاده و صادق بودن نظریه جهش برد متغیر مات منوط به برآورده شدن شرایط زیر به صورت زیر می‌باشد [۸ و ۹]:

$$\bar{W}_{hop,Mott} > k_B T \quad (12-1)$$

$$\left[\bar{R}_{hop,Mott} / \zeta \right] \geq 1 \quad (13-1)$$

۱-۵-۲ نظریه ترابری حاملها از طریق فعال سازی گرمایی (TA)^۱

در دماهای بالا رسانش الکتریکی غالباً به ترابری حامل های آزاد ناشی از برانگیختگی حامل ها از ترازهای ناخالصی (ترازهای کم عمق و عمیق) به نوار رسانش در مواد نوع-n و به نوار ظرفیت در مواد نوع-p نسبت داده می شود. این رسانش معمولاً به کمک نظریه آرنیوس توضیح داده می شود. این نظریه با فرمول کلی [۷، ۸، ۱۳، ۱۴ و ۱۵]:

$$\rho(T)^{-1} = \rho_1^{-1} \exp^{\frac{-E_1}{k_B T}} + \rho_2^{-1} \exp^{\frac{-E_2}{k_B T}} \quad (۱۴-۱)$$

ارایه می شود. که در آن ρ_1 و ρ_2 ضرایب ثابت و مستقل از دما، T دمای مطلق، k_B ثابت بولتزمن و E_1 و E_2 انرژی های فعال سازی مربوط به ترازهای کم عمق و عمیق [۷] و یا مرز دانه ها [۱۶] می باشد. الکترون های جایگزیده در این ترازها با افزایش دما به نوار رسانش برانگیخته شده و در رسانندگی مشارکت می کنند.

به منظور یافتن موقعیت ترازهای انرژی در هر یک از نمونه های مورد بررسی می توان از روش برازش داده های مقاومت ویژه بر حسب دما از طریق کمینه سازی مجموع مربعات استفاده کرد.

¹ Thermal Activation (TA)

فصل دوم

مروری بر مقالات

۱-۲ مقدمه

تکنولوژی لایه های نازک را می توان یکی از قدیمی ترین هنرها (با قدمتی چند هزار ساله) و همچنین یکی از جدیدترین علوم دانست. در حدود چهار هزار سال پیش زرکوبی و طلاکاری در تزیین و مقاوم سازی سطوح و همچنین لایه نشانی جیوه بر روی قطعات مسی انجام می گرفت. اما صرف نظر از امکان استفاده از لایه های نازک، فناوری تولید لایه های نازک از حدود ۳۰۰ سال پیش آغاز شد. می توان گفت اولین لایه های نازک در سال ۱۸۳۷ و با روش الکترولیز تولید شدند. به تدریج با رشد تکنولوژی میکروالکترونیک، در اوایل قرن بیستم ساخت لایه های نازک تر از یک میکرومتر (زیرمیکرونی) اهمیت ویژه ای یافت و در اواخر قرن بیستم با ظهور و پیشرفت مباحث نانومتری و پیدایش روش های شناسایی مواد، تولید لایه های نازک نانومتری (زیر ۱۰۰nm) پیشرفت چشمگیری پیدا کرد. لایه های نازک در ساخت وسایل نوری، الکترونیکی و اپتوالکترونیکی، آینه های لیزر و قطعات آکوستیکی نقش اساسی دارند و شمار زیادی از تحقیقات را به خود اختصاص داده اند [۱۸، ۱۷]. از نظر خواص الکتریکی در ادامه به معرفی چند اکسید فلزی که لایه های نازک آن در فصل ۳ مورد بررسی قرار گرفته اند، می پردازیم.

۲-۲ لایه های نازک اکسید روی

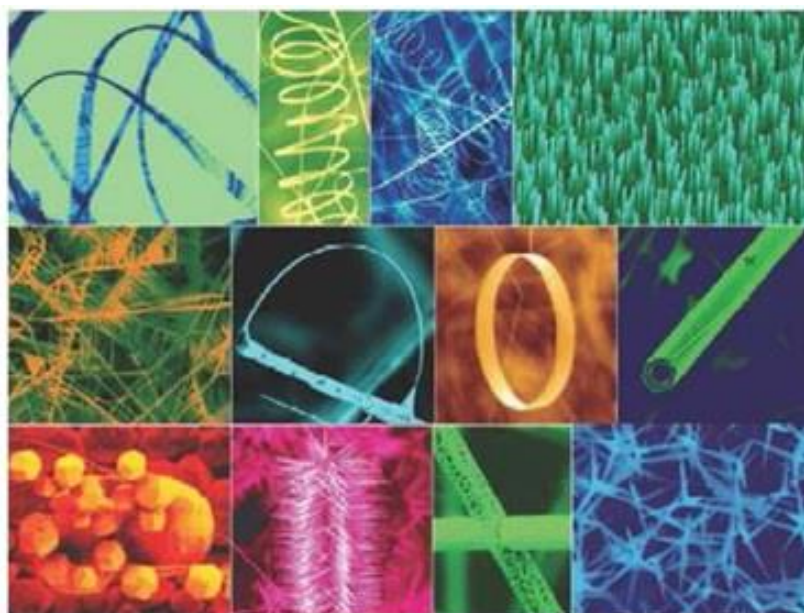
اکسید روی (ZnO) از سال ۱۹۳۵ به صورت گسترده ای مورد مطالعه قرار گرفته و در یک دهه اخیر با توجه به توسعه تکنولوژی رشد آن به صورت تک بلوری و لایه های نازک که منجر به ساخت دستگاه های الکترونیکی و اپتوالکترونیکی گردیده مورد توجه دانشمندان واقع شده است [۱۹].

اکسید روی ماده ای است با کاربردهای متنوع و دارای انواع مختلف مورفولوژی سطحی نظیر نانو سیم ها^۱، نانو میله ها^۲، نانو تسمه ها^۱، نانو قفس ها^۲، نانو شانه ها^۳، نانوفنرها^۴ و ... (شکل ۱-۲) [۲۰]. این

^۱ Nanowires

^۲ Nanorods

لایه‌ها به روش‌های مختلف از جمله لایه‌نشانی بخار شیمیایی^۵ (CVD)، هیدروترمال^۶، سل ژل^۷، تبخیر کربوترمال^۸، لایه‌نشانی بخار شیمیایی آلی-فلزی^۹ (MOCVD) و اسپری پیرولیز^{۱۰} (افشانه داغ) و ... تهیه شده‌اند [۲۶-۲۱].



شکل ۲-۱: مورفولوژی وابسته به ساختارهای لایه‌های نازک ZnO [۲۰].

در شرایط فشار و دمای اتاق، ZnO به شکل ساختار ورتزایت بلوری می‌شود، شکل ۲-۲. این ساختار دارای شبکه شش‌گوشی بوده و با دو زیرشبکه Zn^{+2} و O^{2-} مشخص می‌شود، به طوری که یونهای Zn با چهار وجهی‌های یونهای O و برعکس احاطه شده‌اند [۱۹]

¹ Nanobelts

² Nanocages

³ Nanocombs

⁴ Nanosprings

⁵ Chemical Vapor Deposition

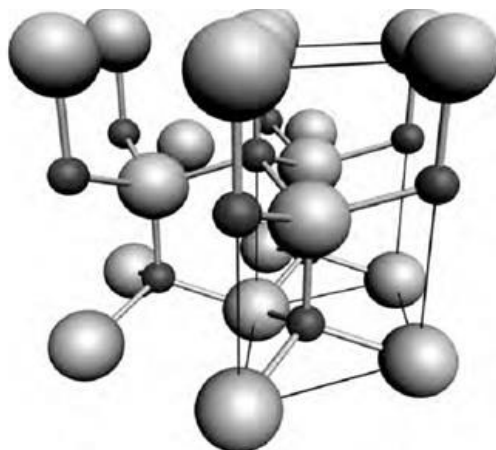
⁶ Hydrothermal

⁷ Sol-gel

⁸ Carbothermal

⁹ Metal-Organic Chemical Vapor Deposition

¹⁰ Spray pyrolysis



شکل ۲-۲: ساختار شش گوشه‌ای ورتزایت اکسید روی. اتم‌های O با کره‌های بزرگ سفید و اتم‌های Zn با کره‌های کوچک سیاه رنگ نشان داده شده است. یک واحد شبکه نیز در شکل مشخص شده است [۱۹].

متداولترین چهار صفحه انتهایی ZnO در ساختار ورتزایت صفحات (0001) منتهی به Zn و صفحات

($\bar{0001}$) منتهی به O که قطبی هستند و صفحات ($11\bar{2}0$) و ($10\bar{1}0$) که شامل تعداد مساوی اتم‌های

Zn و O غیر قطبی می‌باشند [۱۹]. جدول ۱-۲ مجموعه‌ای از پارامترهای فیزیکی ZnO را نشان می‌

دهد. البته هنوز در برخی از موارد قطعیت کافی وجود ندارد. برای مثال، گزارش‌های اندکی در مورد

ZnO به عنوان نیمرسانای نوع p وجود دارد، بنابراین مقادیر تحرک و جرم مؤثر حفره‌ها قطعی نیست

[۲۷]. لایه‌های نازک اکسید روی در اغلب گزارش‌ها به علت تناسب عنصری ناکامل (عمدتاً وجود

تهیج‌های اکسیژن) به عنوان نیمرساناهایی با رسانندگی نوع n شناخته می‌شود

جدول ۱-۲: خواص ZnO ورتزایت در دمای اتاق [۲۷].

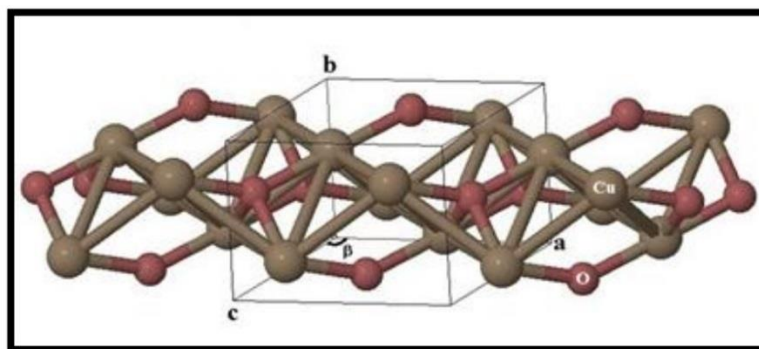
مقدار	خاصیت
۰/۳۲۴۹۵ nm	a_0
۰/۵۲۰۶۹ nm	c_0
۱/۶۰۲	c_0/a_0
۵/۶۰۶ g/cm ³	چگالی
ورتزایت	فاز پایدار
۱۹۷۵ °C	دمای ذوب
۸/۶۵۶	ثابت دی الکتریک استاتیک
۲/۰۰۸	ضریب شکست
۳/۳۷ eV، مستقیم	گاف نواری
۰/۲۴ m_0	جرم مؤثر الکترون
۰/۵۹ m_0	جرم مؤثر حفره
۲۰۰ cm ² /V.s	تحرك الکترون ها
۵-۵۰ cm ² /V.s	تحرك حفره ها

۳-۲ لایه‌های نازک اکسید مس

اکسید مس (CuO) در شرایط تناسب عنصری ناکامل (غالباً دارای تهیج‌های اکسیژن) نیم‌رسانایی از نوع P- می‌باشد که در فازهای (Cu₂O, cuprite) با گاف نواری در حدود ۲ eV و (CuO, tinorite) با گاف نواری در حدود ۱/۲-۲/۱ eV وجود دارد [۲۸]. اکسید مس (CuO) دارای ساختار تک میلی

(مونوکلینیک) بوده (شکل ۳-۲) و ثابت‌های شبکه‌ای آن به ترتیب عبارتند از $a = ۴/۶۸۴ \text{ \AA}$ ، $\beta = ۹۹/۵۰^0$ می باشد [۲۹].

$b = ۳/۴۲۳ \text{ \AA}$ ، $c = ۵/۱۲۹ \text{ \AA}$ و زاویه بین بردارهای شبکه a و c برابر $\beta = ۹۹/۵۰^0$ می باشد [۲۹].



شکل ۳-۲: سلول واحد در شبکه بلوری اکسید مس (CuO) [۲۹].

اکسید مس دارای رنگ قهوه‌ای تیره و متمایل به سیاه است که این تیرگی ناشی از باریکی گاف نواری و گذارهای مستقیم بین نواری می‌باشد [۳۰ و ۳۱]. این امر موجب جذب بالای نور مرئی و استفاده از آن در قطعات اپتیکی می‌باشد. هم چنین اکسید مس (CuO) به دلایلی نظیر فراوانی ماده اولیه، غیرسمی بودن، تولید آسان و توانایی تغییر و بهینه سازی خواص آن با استفاده از روش‌های مختلف مورد توجه بسیار قرار گرفته است.

نانو ساختارهای CuO به دلیل جنبه‌های نظری گوناگون در آنها، ایمنی و محیط زیست دوستی به عنوان مواد الکتروود برای نسل جدید باتری‌های یون-لیتیم قابل شارژ در نظر گرفته شده است [۳۲]. این لایه اکسیدی (CuO) همچنین به دلیل جذب بالای نور مرئی، گسیل گرمایی کم، رسانندگی الکتریکی نسبتاً خوب و غلظت حامل بالا در ساخت سلول‌های خورشیدی به کار می‌روند [۳۳]. خواص آبریزی نانو ساختارهای CuO این ماده را به کاندید امیدوارکننده‌ای برای حفاظت سطحی، انتقال آب، جداسازی آب و روغن و میکروسیال‌ها تبدیل کرده است [۳۴]. علاوه بر این، نانو ساختارهای CuO در دیگر قطعات

از جمله حسگرهای گازی [۳۵]، نانوسیال‌ها [۳۶]، آشکارسازهای نوری [۳۷]، ابر خازن‌ها [۳۸]، فتوکاتالیز [۳۹] و رساناهای ذخیره سازی مغناطیسی [۴۰] مورد استفاده قرار می‌گیرد.

اکسید مس (CuO) نانو مقیاس با شکل‌ها و ابعاد متفاوت از جمله صفر بعدی (0D) نانو ذرات، یک بعدی (1D) نانو لوله، نانو سیم و نانو میله، دو بعدی (2D) نانو صفحه‌ها و سه بعدی (3D) نانوجل‌ها^۱ و نانوساختارهای خارپشت مانند با استفاده از روش‌های مختلف سنتز شده‌اند.

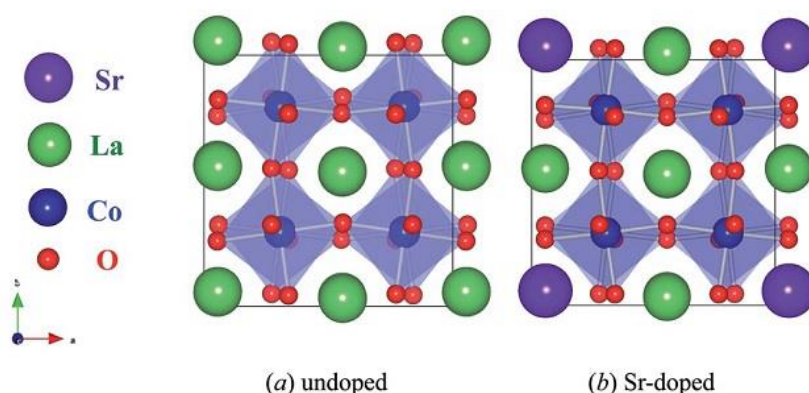
۲-۴ لایه‌های نازک اکسید استرانسیم لانتانیم کبات

کبات لانتانیم آلایش شده با استرانسیم با فرمول کلی $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ (LSCO) دارای ساختار پروسکایت^۲ می‌باشد. این مواد دارای ساختار هشت وجهی می‌باشد که در شکل ۲-۴ الف) LaCoO_3 خالص و ب) LaCoO_3 آلایش شده با Sr نشان داده شده است. با توجه به خواص رسانایی یونی عالی کباتیت‌ها این مواد به کاندید خوبی برای سلول‌های سوختی، راکتور الکتروشیمیایی، دستگاه‌های حافظه فروالکتریک [۴۱ و ۴۲] و کاتالیزور برای اکسیداسیون توولئن [۴۳] و... تبدیل شده است. در طول دو دهه گذشته، رشد روآرستی از پروسکایت‌های مختلف به صورت لایه‌های نازک اکسیدی به روش لایه نشانی آلی-فلزی (MOD)^۳ مورد بررسی قرار گرفته است.

¹nanoflowers

²perovskite

³metal organic deposition



شکل ۲-۴: ساختار هشت وجهی کبالت لانتانیم آلیش شده با استرانسیم [۴۴].

۲-۵ مروری بر مقالات

۲-۵-۱ رسانندگی الکتریکی در لایه‌های نازک ZnO

چینچی لین و همکاران [۷] فرآیند های رسانش الکتریکی را در لایه‌های نازک اکسید روی تک بلور که با استفاده از روش هیدروترمال رشد داده شده‌اند و همچنین در لایه‌های نازک اکسید روی بس بلوری که با استفاده از روش لایه نشانی کندوپاش rf استاندارد روی سطوح شیشه ای تهیه شده‌اند در محدوده دمایی ۲۰K-۵۰۰K مورد بررسی قرار داده‌اند.

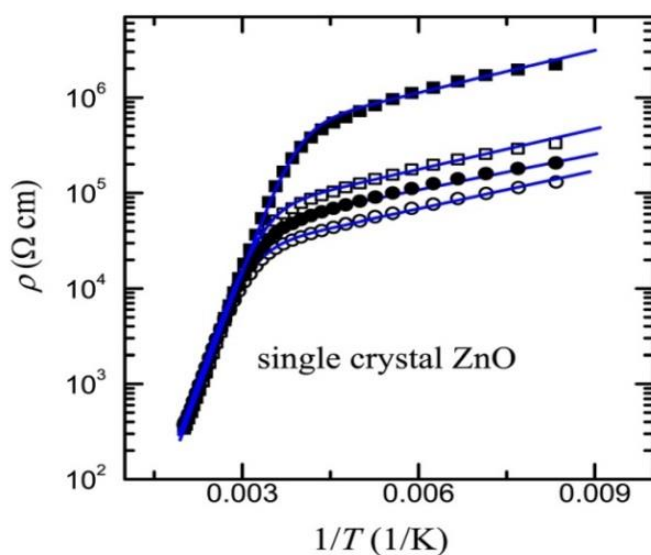
شکل ۱-۵ تغییرات مقاومت ویژه (ρ) را بر حسب دما در لایه‌های نازک ZnO تک بلور در بازه دمایی ۱۱۰K-۵۰۰K نشان می‌دهد در این شکل نمونه‌های رشد یافته قبل و بعد از چرخه گرمایی نشان داده شده است. در این محدوده دمایی فوق‌الذکر داده‌ها را با به کاربردن سازوکار رسانش فعال سازی گرمایی^۱ (معرفی شده در فصل اول، بخش ۵-۲) تحلیل کرده‌اند (شکل ۲-۵). انرژی فعال سازی گرمایی بدست آمده را در ناحیه دمایی بالا (E_1) و ناحیه دمایی پایین (E_2) به ترتیب به وجود بخشنده‌های کم

¹ thermal activation energy

عمق و نسبتا عمیق که با افزایش دما به نوار رسانش برانگیخته می شوند نسبت می دهند. انرژی های فعال سازی گزارش شده در جدول ۲-۲ نشان داده شده است. با اندازه گیری مقاومت الکتریکی $\rho(T)$ تک بلور پس از تکرار چرخه گرمایی در خلا، تهی جاهای اکسیژن را به عنوان دهنده های کم عمق معرفی کرده اند.

جدول ۲-۲: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی مربوط به ناحیه دمایی بالا و پایین.

Single crystal	ρ (300 K) (Ω cm)	ρ_1 (Ω cm)	E_1 (meV)	ρ_2 (Ω cm)	E_2 (meV)
As-grown	5.45×10^4	0.144	334	1.47×10^5	29.2
First-cycled	4.56×10^4	0.154	330	2.50×10^4	28.1
Second-cycled	2.70×10^4	0.145	332	1.72×10^4	24.7
Third-cycled	2.01×10^4	0.125	337	1.02×10^4	26.4



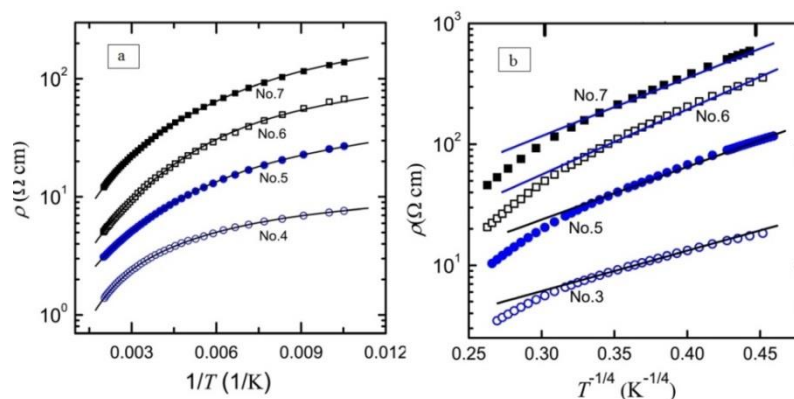
شکل ۲-۵: داده های تجربی مربوط به اکسید روی تک بلور رشد یافته به روش هیدروترمال که با سازوکار رسانش فعال سازی گرمایی تحلیل شده است که در این شکل نمونه رشد یافته قبل از چرخه گرمایی با مربع توپر و نمونه رشد یافته بعد از اول، دوم و سومین چرخه گرمایی با مربع توخالی، دایره توپر و دایره توخالی نشان داده شده است. [۷]

درمورد فیلم های بس بلوری (شکل ۲-۶)، در بازه دمایی ۵۰۰K-۱۵۰ داده ها را با فرآیند رسانش فعال سازی گرمایی (معرفی شده در فصل اول، بخش ۵-۲) تحلیل کرده اند (شکل ۲-۶-الف). انرژی های فعال سازی بدست آمده را به بخشنده های کم عمق و بخشنده های نسبتاً عمیق نسبت داده اند. مقادیر انرژی فعال سازی گزارش شده در جدول ۲-۳ آورده شده است.

جدول ۲-۳: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی مربوط به ناحیه دمایی ۱ و ۲ و ۳.

Film No.	O ₂ flux (SCCM)	ρ (300 K) (Ω cm)	ρ_1 (Ω cm)	E_1 (meV)	ρ_2 (Ω cm)	E_2 (meV)	ρ_3 (Ω cm)	E_3 (meV)
2	0.02	1.66	0.079	120	1.89	35.5	2.63	2.3
3	0.10	2.72	0.407	113	0.758	39.2	5.00	3.1
4	0.15	2.01	0.189	135	1.30	37.5	5.88	2.8
5	0.25	5.89	0.420	135	2.70	26.3	370	5.7
6	0.50	11.3	0.588	129	4.79	27.0	333	5.6
7	0.80	26.0	2.04	121	9.09	37.7	100	4.3

در کاهش بیشتر دما تا زیر دمای ۸۰K فرآیند رسانش جهش برد متغیر مات (معرفی شده در فصل اول، بخش ۵-۲) مشاهده کرده اند (شکل ۲-۶-ب) و مقادیر دمای مشخصه و چگالی سطح فرمی گزارش شده در جدول ۲-۴ آورده شده است.



شکل ۲-۶: داده های تجربی مربوط به اکسید روی بس بلوری که با دو سازوکار: (a) رسانش فعال سازی گرمایی و (b) جهش برد متغیر مات تحلیل شده است [۷].

جدول ۲-۴: مقادیر دمای مشخصه T_M ، چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، نسبت فاصله متوسط جهش‌ها به طول جایگزیده R/ζ و انرژی متوسط جهش‌های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات.

Film No.	ρ_{M0} (Ω cm)	T_M (K)	$N(E_F)$ ($J^{-1} m^{-3}$)	$\frac{\bar{R}_{hop,Mott}}{\zeta}$	$\bar{W}_{hop,Mott}$ (meV)
2	1.36	65	2.5×10^{48}	$1.07/T^{1/4}$	0.98
3	0.61	3510	4.6×10^{46}	$2.89/T^{1/4}$	2.64
4	1.41	854	1.9×10^{47}	$2.03/T^{1/4}$	1.85
5	1.15	10400	1.6×10^{46}	$3.79/T^{1/4}$	3.35
6	1.36	23600	6.9×10^{45}	$4.65/T^{1/4}$	4.14
7	4.18	15200	1.1×10^{46}	$4.16/T^{1/4}$	3.68

بیسواس و همکاران [۸] لایه‌های نازک ZnO نوع-p آرایش شده با As (آرسینیک) که به روش MOCVD^۱ رشد داده شده و به دنبال آن بر روی سطح‌های نیمه عایق GaAs بازپخت گرمایی شده اند را مورد بررسی قرار داده اند. به منظور مطالعه وابستگی ترابری بار به غلظت آرایش، تراکم حامل‌ها را در نمونه‌ها توسط دمای مختلف بازپخت پس از لایه نشانی تغییر داده‌اند. فیلم‌های آرایش شده رسانندگی نوع-p در دمای اتاق را نشان می‌دهد که نمونه‌های A، B و C به ترتیب در دمای ۶۵۰C، ۷۰۰C و ۷۵۰C در محیط اکسیژن باز پخت شده اند. با بررسی وابستگی دمایی مقاومت ویژه الکتریکی در لایه‌ها، رسانندگی dc در محدوده دمایی ۱۰K-۳۰۰K اندازه گرفته اند (شکل ۲-۷). در دماهای پایین تر انتقال نوع- جهش برد متغیر مات (MVRH) و در دماهای بالاتر رسانش نوع-فعال سازی گرمایی (TA) نوار رسانش، سازوکارهای غالب اند. مقادیر انرژی فعال‌سازی گزارش شده در جدول ۲-۵ آورده شده است

¹ Metal Organic Chemical Vapor phase Deposition

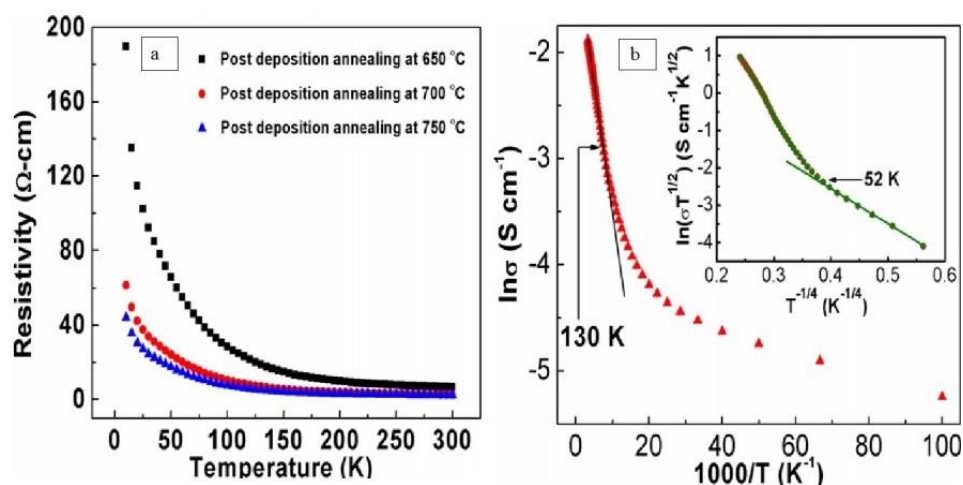
جدول ۲-۵: مقادیر انرژی فعال سازی گرمایی برای نمونه های A، B و C.

Sample	Hole concentration (cm^{-3})	Temperature range		Activation energy for TA band conduction (meV)
		TA band conduction	Mott VRH conduction	
A	4.5×10^{18}	130–300 K	10–52 K	167
B	2.8×10^{19}	116–300 K	10–41 K	142
C	5.7×10^{19}	110–300 K	10–35 K	134

آلایش As به جای اتم های Zn در لایه نازک ZnO باعث ایجاد ترازهای ناخالصی در بالای نوار ظرفیت می گردد. این امر می تواند انتقال حامل های بار از طریق جهش برد متغیر مات در دماهای نسبتاً پایین را تسهیل کند. مقادیر پارامترهای دمای مشخصه، چگالی سطح فرمی، انرژی جهش ها و فاصله متوسط جهش های تخمین زده در جدول ۲-۶ آورده شده است.

جدول ۲-۶: مقادیر چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R و W انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیر مات.

Sample	$N(E_F) (\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1})$	R (cm)	W (meV)	αR
A	1.06×10^{24}	3.51×10^{-8}	5.2	4.5
B	1.23×10^{25}	1.19×10^{-8}	11.5	10
C	4.62×10^{25}	0.81×10^{-8}	8.2	8.2



شکل ۷-۲: الف) داده‌های تجربی مربوط به ZnO آلاینش شده با As در دمای بازپخت متغیر (ب) نمونه A با که با دو سازوکار رسانش فعال سازی گرمایی و جهش برد متغیر مات تحلیل شده است [۸].

رامبو و همکاران [۹] رسانندگی الکتریکی را در لایه‌های نازک اکسید روی (ZnO) آلاینش شده با Fe (۰-۱۰٪ وزنی) که با استفاده از روش جانشانی دورانی^۱ تهیه شده است در محدوده دمایی ۳۰۰-۴۳۰ K مورد بررسی قرار دادند. شکل ۸-۲ نمودار نیم لگاریتمی رسانندگی الکتریکی بر حسب عکس دما برای نمونه‌های Z.F.1 (ZnO)، Z.F.2 (Fe:ZnO, 6%)، Z.F.3 (Fe:ZnO, 8%) و Z.F.4 (Fe:ZnO, 10%) را نشان می‌دهد. با افزایش میزان آهن، اندازه بلور از $196 \text{ \AA}$ به $255 \text{ \AA}$ افزایش می‌یابد و نتایج XPS نشان می‌دهد که هر دو یون Fe^{2+} و Fe^{3+} جایگزین Zn^{2+} در فیلم‌های تهیه شده می‌شود. از لحاظ تئوری، رسانندگی الکتریکی باید برای لایه‌ها با اندازه دانه‌های بزرگتر افزایش یابد اما در این مورد نمونه‌های ZnO آلاینش شده با Fe حتی با افزایش دانه لایه، کاهش رسانندگی الکتریکی مشاهده شده است که مقدار رسانندگی الکتریکی ZnO با آلاینش ناخالصی Fe تا دو برابر کاهش نشان داده است. که این کاهش را می‌توان به این واقعیت نسبت داد که هنگامی که یون‌های Fe در اکسید روی ترکیب

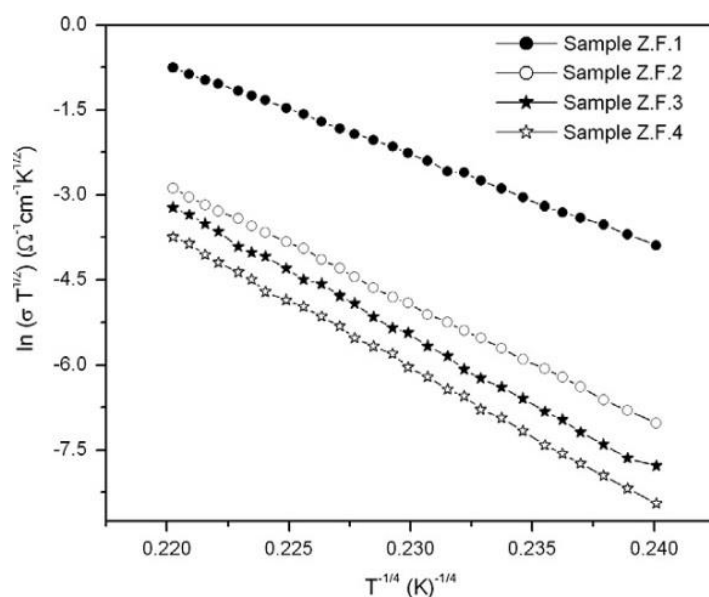
¹spin coating

می‌شود، یون های Fe به عنوان دهنده‌های عمیق رفتار می کنند و غلظت دهنده های ذاتی را کاهش می‌دهند.

وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی با استفاده از سازوکار جهش برد متغیر مات تحلیل شده است که این مدل بیانگر این است که رسانندگی از طریق جهش بین حالت های جایگزیده امکان پذیر است. مقدار پارامترهای گزارش شده از جمله دمای مشخصه مات، چگالی سطح فرمی ، انرژی جهش و فاصله جهش ها در جدول ۷-۲ آورده شده است.

جدول ۷-۲: مقادیر چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R و W انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیر مات.

Sample	T_0 (K)	$N(E_F)$ ($\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)	R (cm)	W (eV)	αR
Z.F.1	6.35×10^8	2.92×10^{20}	1.47×10^{-7}	0.25	14.75
Z.F.2	1.95×10^9	9.52×10^{19}	1.95×10^{-7}	0.33	19.53
Z.F.3	3.15×10^9	5.89×10^{19}	2.20×10^{-7}	0.37	22.02
Z.F.4	3.28×10^9	5.66×10^{19}	2.22×10^{-7}	0.38	22.24



شکل ۸-۲: داده‌های تجربی مربوط به اکسید روی آلیش شده با Fe که با سازوکار MVRH تحلیل شده است [۹].

۲-۵-۲ رسانندگی الکتریکی در لایه‌های نازک CuO

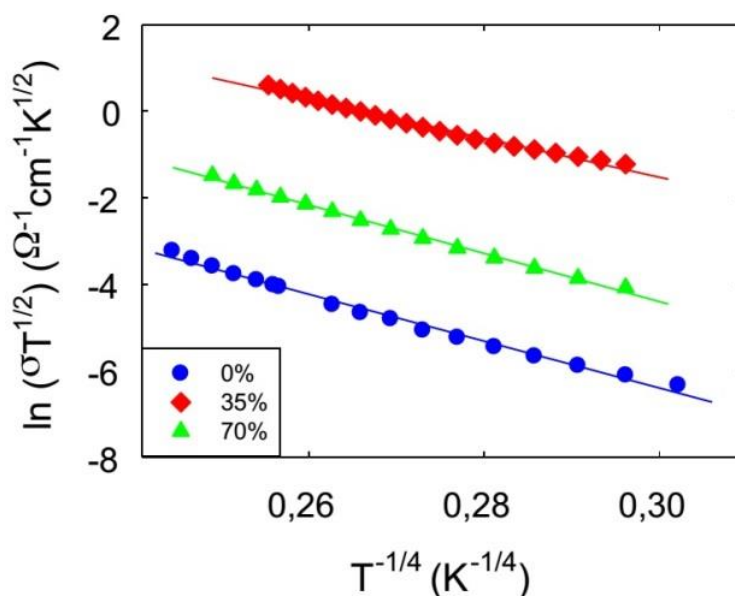
سیرین و همکاران [۱۰] خواص الکتریکی لایه‌های نازک اکسید مس (CuO) آرایش شده با اکسیژن (۰٪، ۳۵٪، ۷۰٪ ml/s) که با روش کندوپاش مگنترون روی سطح شیشه تهیه شده‌اند مورد بررسی قرار دادند (شکل ۲-۹). در شکل ۲-۹ رسانندگی الکتریکی با افزایش دما، افزایش پیدا کرده است که نشان دهنده رفتار نیمرسانای لایه‌های نازک CuO می‌باشد. مقدار رسانندگی الکتریکی لایه‌های CuO با میزان شار اکسیژن ۳۵٪-۷۰٪ نسبت به لایه با میزان شار اکسیژن ۰٪، بزرگتر است. که این افزایش رسانندگی با شار اکسیژن متفاوت برای لایه‌ها را به بهتر (زیاد) شدن چگالی سطح فرمی نسبت داده اند.

داده‌های رسانندگی الکتریکی لایه‌های CuO در محدوده دمایی ۱۰۰ K-۲۶۰ را با استفاده از سازوکار رسانش از طریق جهش برد متغیرمات تحلیل کرده‌اند که این بدان معنی است که در این محدوده دمایی رسانش از طریق جهش حامل‌های بار در حالت‌های جایگزیده رخ می‌دهد. پارامترهای دمای مشخصه مات، چگالی سطح فرمی، انرژی جهش و فاصله جهش‌های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات در جدول ۲-۷ آورده شده است. رابطه مستقیمی بین خواص الکتریکی با چگالی حالت (DOS)^۱ برقرار است. افزایش $N(E_F)$ موجب افزایش رسانندگی الکتریکی می‌شود، بنابراین می‌توان آن را دلیلی بر تغیر رسانندگی با شار اکسیژن برشمرد. مقدار $N(E_F)$ برای لایه CuO با میزان شار اکسیژن ٪ ۳۵ نسبت به دیگر لایه‌ها بیشتر است.

¹ Density Of State

جدول ۸-۲: مقادیر دمای مشخصه T_0 ، چگالی سطح فرمی $N(E_F)$ ، فاصله متوسط جهش ها R_{hop} و W_{hop} انرژی متوسط جهش های تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیرمات.

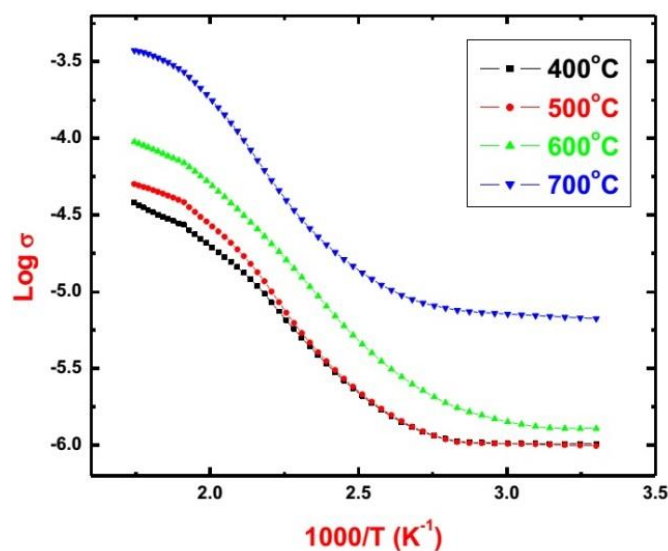
Oxygen flow rate	T_0 (K)	$N(E_F)$ ($\text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$)	R_{hop} (nm)	W_{hop} (meV)
0%	$1.59 \times 10^7 \pm 35$	$2.82 \times 10^{21} \pm 10^6$	1.050 ± 0.041	72.44 ± 2.8
35%	$9.80 \times 10^6 \pm 40$	$4.57 \times 10^{21} \pm 10^6$	0.934 ± 0.042	64.23 ± 2.9
70%	$1.08 \times 10^7 \pm 6$	$4.16 \times 10^{21} \pm 10^6$	0.956 ± 0.026	65.76 ± 1.8



شکل ۹-۲: داده های تجربی مربوط به اکسیدمس با میزان جریان اکسیژن متغیر [۱۰].

جاندل و همکاران [۱۶] خواص الکتریکی نانوبلور لایه های نازک اکسید مس (CuO) که با روش سل-ژل روی سطح های شیشه ای تهیه شده اند مورد بررسی قرار دادند (شکل ۱۰-۲). رسانندگی الکتریکی dc لایه های CuO به عنوان تابعی از دما در محدوده دمایی 300°C - 600°C اندازه گیری شد.

وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی دو ناحیه مجزا با دوسازوکار متفاوت را نشان می‌دهد. در ناحیه دمایی پایین سازوکار جهش برد متغیر و در ناحیه دمایی بالا با استفاده از معادله آرنیوس (معرفی شده در فصل ۱، بخش ۵-۲) داده‌ها تحلیل شده‌اند. انرژی فعال‌سازی انتقال الکتریکی لایه‌ها نازک CuO محاسبه شد که برای ناحیه دمایی بالا که خود به دونا حیه تقسیم می‌شود با تغییر دمایی بازپخت از ۴۰۰-۶۰۰ °C در محدوده ۰/۱۲ eV-۰/۲۴ eV به ۰/۰۷۵ eV-۰/۰۹ eV گزارش شده است. جاندل و همکاران انرژی فعال‌سازی را به مرز دانه‌ها نسبت داده‌اند.

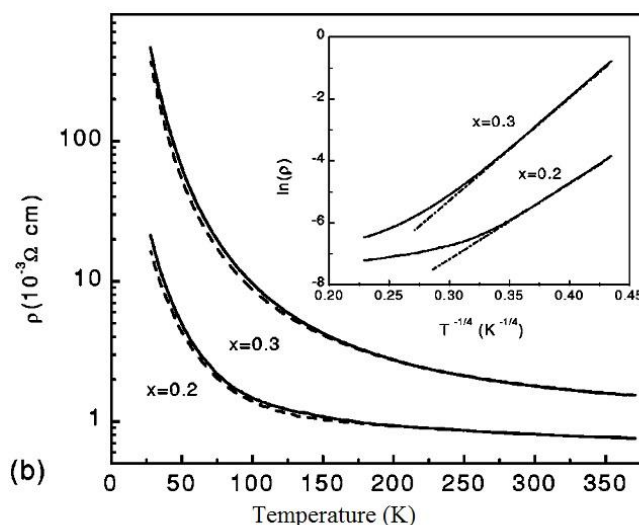


شکل ۲-۱۰: داده‌های تجربی مربوط به CuO با دمایی بازپخت متغیر از ۴۰۰-۶۰۰ °C. [۱۶]

۳-۵-۲ رسانندگی الکتریکی در لایه‌های نازک $\text{La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{CoO}_3$

یانگ سان و همکاران [۱۱] با اندازه‌گیری خواص الکتریکی اثر آلیش Fe در نمونه‌ها بس بلوری $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{CoO}_3$ تهیه شده است در گستره‌ی دمایی ۷۰ K-۳۷۰ مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۱۱-۲).

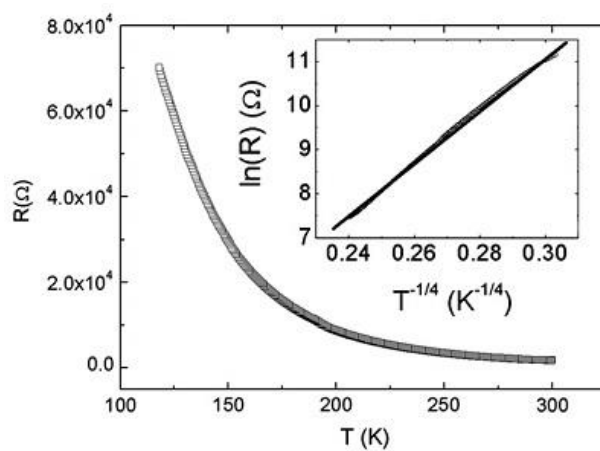
نمونه‌ها با آلیش پایین ($x < 0.1$) رفتار فلزی از خود نشان می‌دهند در حالی که برای نمونه‌های با آلیش بالا $x = 0.2$ و $x = 0.3$ رفتار نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهند. برای نمونه‌ها با آلیش بالا به این نتیجه رسیدند که مقاومت الکتریکی نمونه‌ها با آلیش بالا در محدوده دمایی پایین با مدل جهش برد متغیر مطابقت داد. T_0 تخمین زده با سازوکار جهش برد متغیر برای نمونه‌های آلیش شده با Fe با $x = 0.2$ و $x = 0.3$ به ترتیب $10^5 \times 3/54$ K- $10^6 \times 1/15$ گزارش شده است. مقدار T_0 برای نمونه با $x = 0.3$ نسبت به نمونه $x = 0.2$ بیشتر است که این افزایش را به آلیش آهن (Fe) نسبت داده‌اند.



شکل ۱۱-۲: مقاومت الکتریکی بر حسب دما برای نمونه‌های $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{CoO}_3$ آلیش شده با Fe [۱۱].

جین وهمکاران [۱۲] وابستگی دمایی مقاومت سطحی^۱ را برای ساختار ناهمگون^۲ لایه نازک $La_{0.5}Sr_{0.5}CoO_{3-\sigma}$ که روی سطح Si نوع-n با روش پالس لیزری لایه نشانی شده است در محدوده دمایی ۱۲۰-۳۰۰ K را مورد بررسی قرار داده‌اند. همانطور که در شکل ۲-۱۲ مشاهده می‌شود لایه LSCO یک رسانندگی فلزی خوبی از خود نشان می‌دهد و رسانش (انتقال) به میزان اکسیژن خیلی حساس می‌باشد. رفتار رسانش نیمرسانای این لایه از تهی‌جای اکسیژن سرچشمه می‌گیرد.

داده‌های مقاومت الکتریکی لایه LSCO را با سازوکار جهش برد متغیر (VRH) تحلیل کرده‌اند. همانطور که در شکل ۲-۱۲ دیده می‌شود در محدوده دمایی اندازه‌گیری شده، داده‌های مقاومت الکتریکی با سازوکار VRH به خوبی مطابقت یافته است. مقادیر پارامترهای دمای مشخصه و چگالی سطحی تراز فرمی به ترتیب $14/1 \times 10^6$ K و $2/7 \times 10^{20}$ cm⁻³ گزارش شده است.



شکل ۲-۱۲: وابستگی دمایی مقاومت سطحی در لایه نازک LSCO [۱۲].

¹ In-plane resistance

² heterostructure

فصل سوم

بررسی نظری داده های تجربی

۱-۳ مقدمه

در این فصل به بررسی نظری داده های تجربی رسانندگی (مقاومت ویژه) الکتریکی در لایه های نازک نیمرسانا با استفاده از دو سازوکار فعال سازی گرمایی (TA) و جهش برد متغیر مات (VRH) می پردازیم. در بخش ۲-۳ در خصوص نحوه وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی فیلم های نازک $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ را مورد بررسی قرار می دهیم. در بخش ۳-۳ به بررسی نحوه وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی لایه های نازک CuO خالص و آلایش شده با روتینیوم (Ru) می پردازیم. در بخش ۴-۳ نحوه وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی لایه های نازک ZnO را تحلیل و مورد بررسی قرار داده ایم.

۲-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ در گستره دمایی

۳۲۰ K-۷۷

هدف ما در این تحقیق بررسی داده های تجربی دایودی و همکاران [۴۵ و ۴۶] در خصوص نحوه وابستگی دمایی در گستره دمایی ۳۲۰ K-۷۷ مقاومت ویژه الکتریکی لایه های نازک اکسید فلزی با ترکیب $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ (LSCO) می باشد که با روش لایه نشانی آلی - فلزی^۱ (MOD) یک بار بر روی سطح تک بلور SrTiO_3 (STO) [۴۵] و بار دیگر نمونه ای بر سطح تک بلور LaAlO_3 (LAO) [۴۶] لایه نشانی شده است. روش تهیه لایه به این صورت می باشد که ابتدا محلول آغازین با ترکیب محلول رقیق شده فلز - نفتنات^۲ با محلول تولوئن به منظور بدست آوردن ضخامت و چسبندگی لازم تهیه می شود. نسبت مولی La, Sr, و Co در محلول نهایی به ترتیب ۰/۷، ۰/۳ و ۱/۰ می باشد. این محلول روی سطح

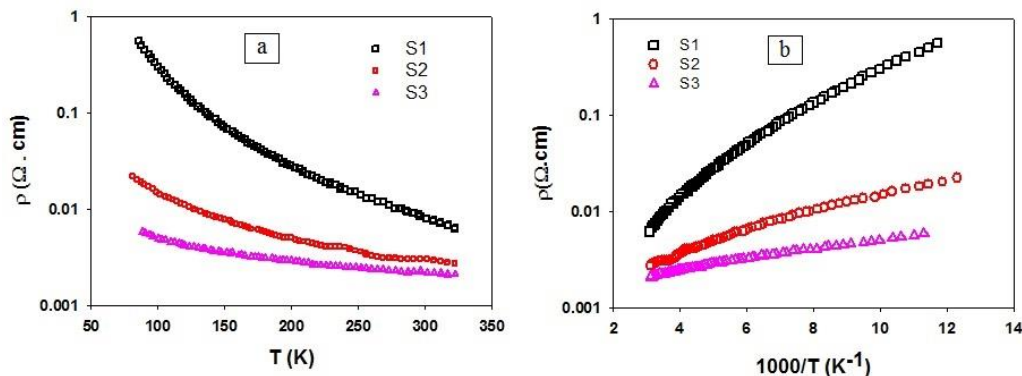
¹ metal-organic deposition

² metal-naphthenate

های تک بلور STO و LAO به روش جانشانی دورانی^۱ با سرعت چرخش ۴۰۰۰ rpm به مدت ۱۰ s انجام شده است. در انتها این نمونه‌های رشد یافته بر روی زیر لایه STO [۴۵] در دماهای مختلف ۶۰۰، ۷۰۰ و ۸۰۰ °C (به ترتیب نمونه‌های S1، S2 و S3) بازپخت شده‌اند و نمونه لایه نشانی شده بر روی زیرلایه LAO [۴۶] در دمای ۶۰۰ (نمونه L) بازپخت شده‌اند. در ادامه به بررسی این نمونه‌ها پرداخته‌ایم.

الف: نمونه‌های رشد یافته بر روی زیر لایه STO

شکل ۱-۳ وابستگی دمایی مقاومت ویژه الکتریکی این نمونه‌ها که به روش چهار پایانه ای DC^۲ در گستره ۳۲۰ K تا دمای نیتروژن مایع (۷۷K) اندازه گیری شده‌اند در دو وضعیت $\rho \sim T$ و $\rho \sim 1000/T$ در نمودارهای نیم لگاریتمی نشان می‌دهد [۴۵].

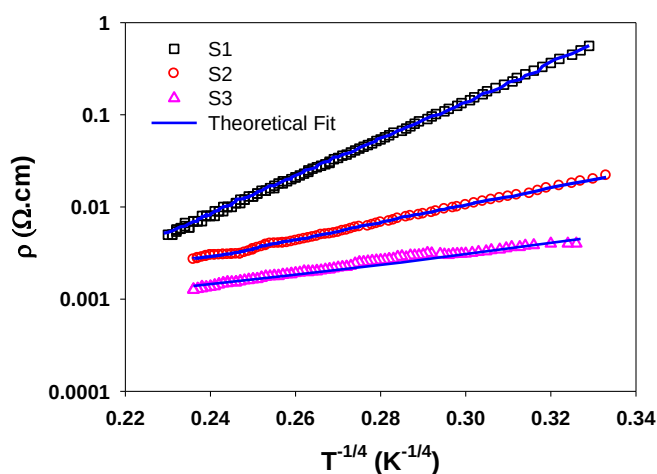


شکل ۱-۳: الف) وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی و ب) مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در فیلم‌های نازک LSCO [۴۵].

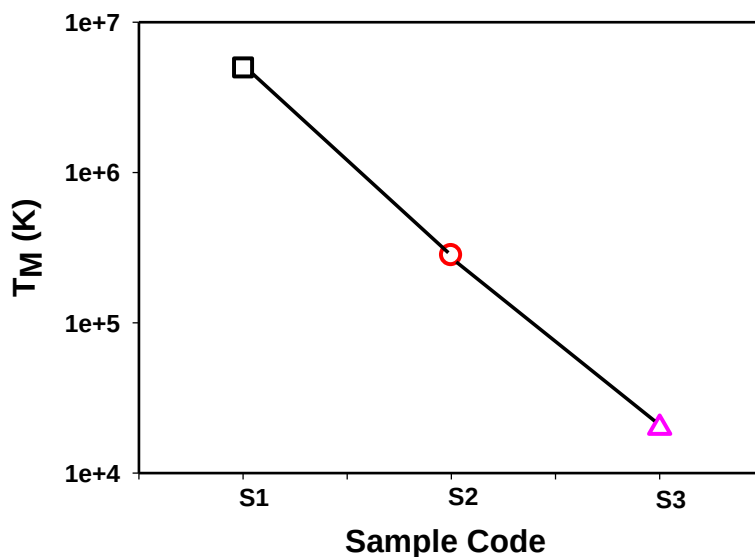
¹ spin coating

² DC four-probe

با توجه به گزارش دایودی و همکاران [۴۵] چنانچه پیداست مقاومت الکتریکی برای فیلم های LSCO به طور منظم با افزایش دما کاهش یافته اند که این کاهش نشانگر رفتار نیمرسانایی نمونه هاست. به منظور تحلیل این داده ها به روش چین چی لین [۷]، که در فصل ۱ بدان اشاره شد اقدام گردید. در این شیوه ابتدا لازم است شرایط وقوع ترابری به صورت جهشی با برد متغیر مات (MVRH) (معادلات ۱۱-۲ و ۱۲-۲) را در نمونه ها تحقیق نموده و چنانچه این شرایط برقرار نباشد از نظریه آرنیوس برای ترابری حاملها استفاده نماییم. اکنون در مرحله اول به بررسی شرایط لازم برای وقوع رسانندگی جهش برد متغیر از معادله ۱-۵ استفاده می کنیم. با برازش داده ها در این معادله که انتظار می رود $\ln(\rho)$ با $T^{-1/4}$ تغییر یابد به کمک شیب مقدار پارامتر T_M را بدست می آوریم. تحلیل انجام شده در شکل ۲-۳ و نتایج بدست آمده در شکل ۳-۳ ارائه گردیده است. لازم به ذکر آنکه مقادیر بدست آمده برای دمای مشخصه نمونه های S1 و S2 با مقدار گزارش شده توسط پروخروف و همکاران [۴۷] برای ترکیب مشابه با این نمونه ها به صورت $\text{La}_{0.75}\text{Sr}_{0.25}\text{CoO}_3$ که برابر $10^5 \times 1/4$ K می باشد قابل قیاس می باشد.

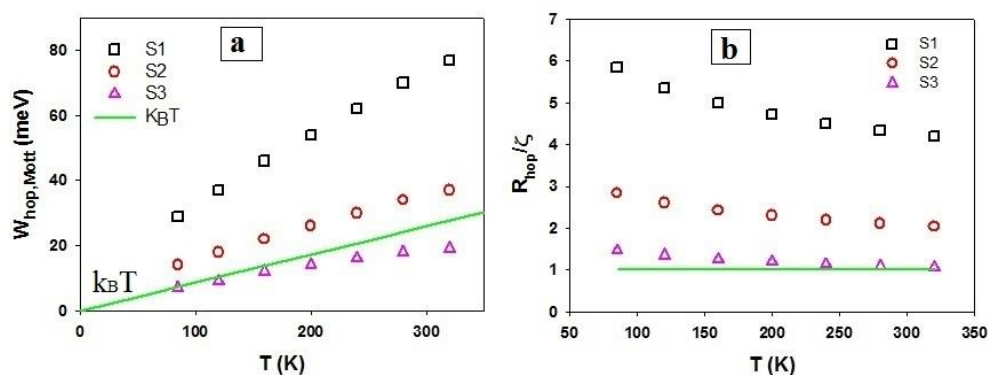


شکل ۲-۳: تغییرات لگاریتمی ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های S1 و S2 و S3 خطوط سیاه نشانگر خطوط برازشی بر مبنای نظریه مات (MVRH) می باشد.



شکل ۳-۳: تغییرات دمای مشخصه T_M برای نمونه های S1, S2 و S3.

با معلوم شدن مقادیر T_M در نمونه ها (شکل ۳-۳) و قرار دادن آن در معادلات ۷-۱ و ۱۰-۱ میانگین انرژی جهش ها ($\bar{W}_{hop,Mott}$) و نسبت فاصله متوسط جهش ها به شعاع بوهر ($\bar{R}_{hop,Mott} / \zeta$) را بر حسب دما بدست می آوریم (مقدار ζ برای لایه های نازک LSCO برابر با ۰/۶۸ nm گزارش شده است [۴۷]) شکل ۴-۳ حاصل این نتایج را نشان می دهد. اکنون با معلوم شدن این نتایج به بررسی شرط های لازم (معادلات ۱۲-۱ و ۱۳-۱) جهت تحقق نظریه جهشی حاملها می پردازیم. در شکل ۴-۳ الف با توجه به معادله (۱۲-۱) به منظور مقایسه W_{hop} با $k_B T$ نمودار تغییرات آن با خط خاکستری نشان داده شده است.



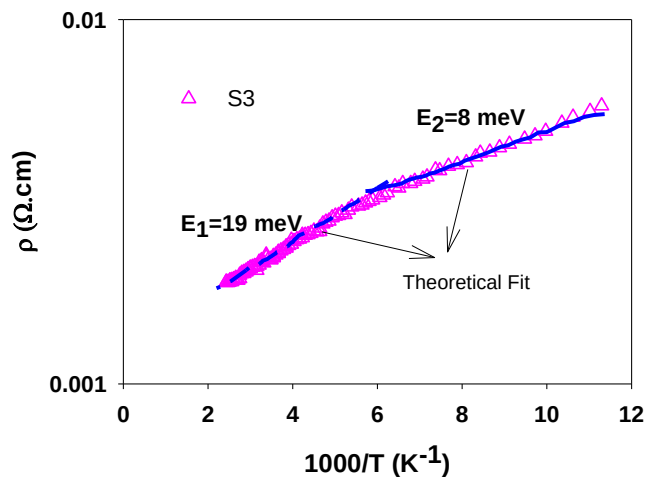
شکل ۳-۴: تغییرات: الف) $W_{hop,Mott}$ و ب) $\frac{R_{hop}}{\zeta}$ بر حسب دما برای نمونه های S1، S2 و S3.

چنانچه پیداست نمونه های S1 و S2 بخوبی از شرایط وابسته به وقوع ترابری جهشی پیروی کرده لیکن نمونه S3 شرایط را به صورت کامل برآورده نکرده و در نتیجه انتظار می رود در نمونه اخیر سازوکار حامل های آزاد با سازوکار رسانش آرنیوس (معادله ۱-۱۴) مرتبط باشد. قبل از تحلیل این نمونه، از آنجا که نمونه های S1 و S2 شرایط وابسته به وقوع ترابری جهشی را برآورده کرده اند می توان تراکم حامل های انرژی را در موقعیت تراز فرمی ($N(E_F)$) را برای این نمونه ها با استفاده از معادله ۱-۹ بدست آورد. نتایج بدست آمده در جدول ۳-۱ گزارش شده است. در خصوص نحوه تغییرات داده ها در شکل ۳-۴ می توان گفت، در شکل ۳-۴ الف شیب داده ها مثبت بوده که به معنای آن است که با افزایش دما انرژی جهش ها افزایش می یابند که امری منطقی است. از طرفی با توجه به نتایج بدست آمده در شکل ۳-۴ ب با افزایش دما شیب داده ها منفی است. به این معنی که با افزایش دما طول متوسط جهش ها رو به کاهش است. این موضوع با توجه به اینکه با افزایش دما به تراکم فونون ها افزوده شده و این به نوبه خود سبب افزایش احتمال پراکندگی حامل ها می گردد، نهایتاً سبب کاهش طول متوسط جهش ها خواهد شد. تغییرات متوسط فاصله جهش ها به میزان ناخالصی و شعاع بوهر بستگی دارد. مقادیر تغییرات مربوط $\bar{W}_{hop,Mott}$ و $\bar{R}_{hop,Mott}$ در گستره دمایی ۷۷ K-۳۰۰ در ستون های ۳ و ۴ در جدول ۳-۱ ارائه گردیده است.

جدول ۱-۳: $\bar{W}_{hop,Mott}$, $\bar{R}_{hop,Mott}$, مقدار T_M , $N(E_F)$ در نمونه های S1, S2 و S3.

نمونه	T_M (K)	$\bar{W}_{hop,Mott}$ (meV)	$\bar{R}_{hop,Mott}$ (nm)	$N(E_F)$ ($J^{-1}m^{-3}$)
S1	$5/00 \times 10^6$	۷۷-۲۹	۲/۸۵-۳/۹۷	$8/31 \times 10^{44}$
S2	$2/80 \times 10^5$	۳۷-۱۴	۱/۳۸-۱/۹۲	$1/48 \times 10^{46}$
S3	$2/00 \times 10^4$	۱۹-۷	۰/۷۲-۱	-

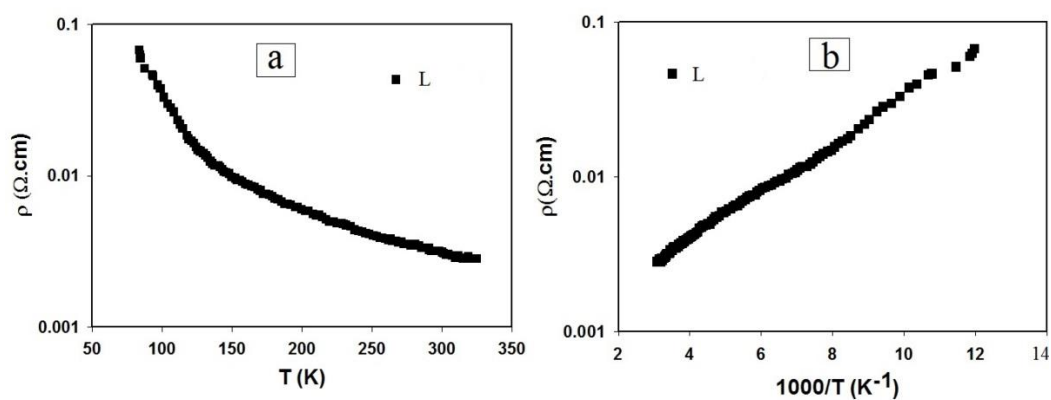
از آنجا که نمونه S3 از نظریه جهشی حامل ها تبعیت نمی کند بنابراین مدل کاربردی در این نمونه که از مقاومت ویژه کمتر (و یا رسانندگی الکتریکی بیشتر) برخوردار است از مدل برانگیختگی آرنیوس و رسانش حامل های آزاد (در نوار رسانش) (معادله ۱-۱۴) پیروی می کند. این نمونه در ناحیه دمایی ۷۷-۳۲۰ K دارای دو شیب متفاوت می باشد. به منظور تحلیل داده ها این گستره دمایی را به دو ناحیه دمایی بالا و پایین تقسیم بندی کرده ایم. E_1 انرژی فعال سازی تراز ناخالصی مربوط به ناحیه دمایی بالا (K) ۳۲۵ - ۱۸۰ و E_2 انرژی فعال سازی تراز ناخالصی مربوط به ناحیه دمایی پایین (K) ۱۸۰ - ۸۸ می باشد. انرژی های فعال سازی وابسته به ترازهای کم عمق و نسبتاً عمیق در S3 را به روش برازش داده ها از طریق کمینه سازی مجموع مربعات تعیین نمودیم. نتایج بدست آمده در شکل ۳-۵ نشان داده شده است. این نتایج نشانگر آن است که با افزایش دما از ۷۷ K ابتدا ترازهای انرژی واقع در انرژی ۸ meV زیر لبه نوار ظرفیت برانگیخته شده و با رسیدن به محدوده دمایی بالاتر ($T > 150$ K) برانگیختگی حامل ها واقع در تراز عمیق تر ۱۹ meV انجام گرفته است. این ترازها از ناکاملی های بلوری منشأ گرفته است.



شکل ۳-۵: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ برای نمونه S3. در این شکل خطوط نشان داده شده، خطوط برازشی مبتنی بر نظریه آرنیوس می باشد.

ب) نمونه رشد یافته بر روی لایه LAO

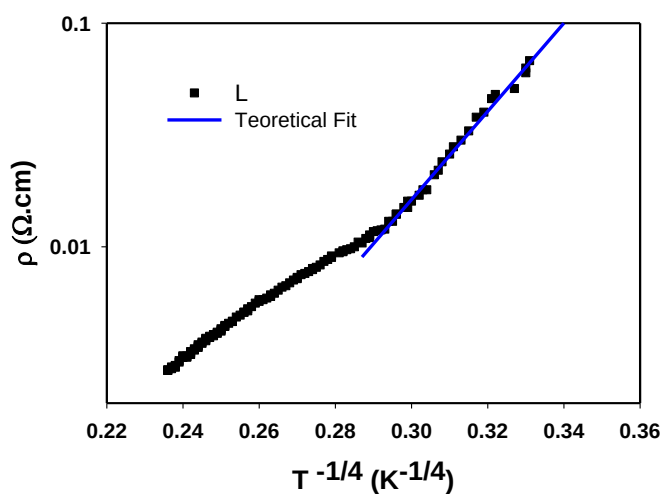
شکل ۳-۶ وابستگی دمایی مقاومت ویژه الکتریکی این نمونه که به روش چهار پایانه ای DC در گستره 320 K تا دمای نیتروژن مایع (77 K) توسط دایودی و همکاران [۴۶] اندازه گیری شده اند در دو وضعیت $\rho \sim T$ و $\rho \sim 1000/T$ در نمودارهای نیم لگاریتمی نشان می دهد.



شکل ۳-۶: الف) وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی و ب) مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در فیلم های نازک LSCO [۴۶].

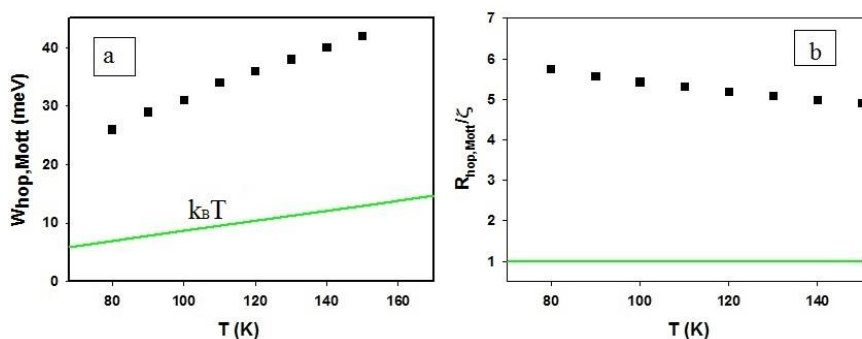
چنانچه پیداست مقاومت الکتریکی برای لایه LSCO به طور منظم با افزایش دما کاهش یافته اند که این کاهش نشانگر رفتار نیمرسانایی نمونه است. همانند بخش ۱-۵-۳ این داده همچنین نشان می‌دهد که تغییرات مقاومت ویژه دارای دو شیب متفاوت می‌باشد. ما این تغییرات را در دو ناحیه دمایی، ناحیه دمای پایین (۷۷ K-۱۵۰) و ناحیه دمای بالا (۱۵۰ K-۳۲۰) تقسیم‌بندی کرده ایم. انتظار می‌رود در ناحیه دماهای بالاتر رسانندگی الکتریکی لایه نازک LSCO توسط سازوکار رسانش فعال‌سازی گرمایی (TA) و در دماهای پایین‌تر رسانندگی از طریق جهش برد متغیر مات (MVRH) بین حالت های جایگزیده انجام گیرد.

در گستره دمایی پایین با برازش داده‌ها با معادله ۱-۵ انتظار می‌رود $\ln(\rho)$ با دما به صورت خطی با $T^{-1/4}$ تغییر یابد. به کمک شیب نمودار می‌توان مقدار پارامتر T_M را بدست آورد. تحلیل انجام شده در شکل ۳-۷ ارائه گردیده است و مقدار T_M برابر $T_M = 4/4 \times 10^6 \text{ K}$ بدست می‌آید.



شکل ۳-۷: تغییرات لگاریتمی ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه بازپخت شده در دمای 600°C ، خط سیاه در این نمونه نشانگر برازشی نظری بر مبنای نظریه مات (MVRH) می‌باشد.

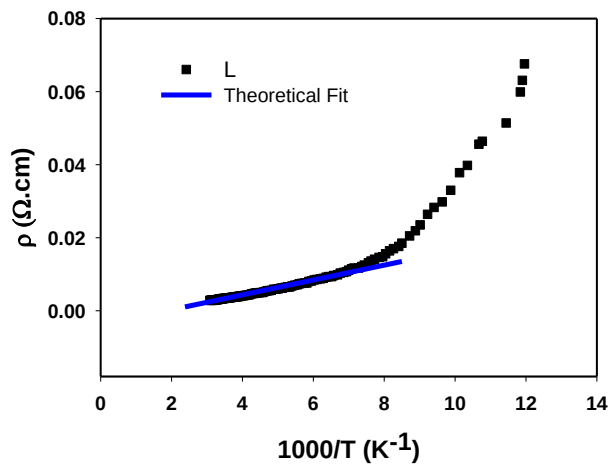
با معلوم شدن مقدار T_M در نمونه و قرار دادن آن در معادلات ۷-۱ و ۱۰-۱ می‌توان میانگین انرژی جهش‌ها و فاصله متوسط جهش‌ها را محاسبه کرد (شکل ۸-۳). اکنون با معلوم شدن این نتایج به بررسی شرط‌های لازم (معادلات ۱۲-۱ و ۱۳-۱) جهت تحقق نظریه جهشی حاملها می‌پردازیم شکل ۸-۳ الف و ب بترتیب تغییرات $\bar{W}_{hop}$ (به همراه تغییرات $k_B T$) و $\bar{R}_{hop} / \zeta$ را بر حسب دما نشان می‌دهد.



شکل ۸-۳: تغییرات: الف) $\bar{W}_{hop,Mott}$ و ب) $\bar{R}_{hop,Mott} / \zeta$ بر حسب دما برای نمونه بازپخت شده در 600°C .

همانطور که از شکل ۸-۳ مشاهده می‌شود این نمونه شرط‌های لازم برای صدق نظریه VRH برآورده کرده است اکنون با توجه به صدق نظریه رسانایی جهشی الکترونی در این نمونه با استفاده از معادله ۹-۱ به تعیین تخمینی از تراکم حالت‌ها در محل تراز فرمی ($N(E_F)$) پرداختیم که مقدار بدست آمده $(J^{-1}m^{-3}) 9/43 \times 10^{44}$ می‌باشد.

برای تحلیل داده‌ها در این نمونه در ناحیه دمایی بالا از سازوکار انتقال فعال سازی گرمایی (معادله ۱۴-۱) بهره برده و انرژی فعال سازی وابسته را در هر یک از نمونه‌های مورد بررسی به روش برازش داده‌ها از طریق کمینه سازی مجموع مربعات تعیین نمودیم. تحلیل انجام شده در شکل ۹-۳ ارائه گردیده است.



شکل ۳-۹: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ برای نمونه بازپخت شده درط دمای 600°C در این شکل خط مستقیم نشان داده شده، نشانگر پیش بینی نظری مبتنی بر نظریه آرنیوس می باشد.

انرژی فعال سازی $31/67\text{ meV}$ بدست آمد که مربوط به ترازهای ناخالصی که در گاف نواری ایجاد می شود، نسبت داد. این ترازها در اثر ناکاملی های بلوری از جمله جایگزینی اتم Sr بجای La در گاف نواری ایجاد شده اند [۴۴].

نتیجه گیری

در این بخش داده های وابستگی دمایی مقاومت ویژه الکتریکی $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ گزارش شده توسط دایودی و همکاران که بر روی زیر لایه STO [۴۵] ($\text{S1}, \text{S2}, \text{S3}$) و زیر لایه LAO [۴۶] (نمونه L) لایه نشانی شده است مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. نمونه های S1 و S2 را با استفاده از سازوکار جهش برد متغیر مات (MVRH) و نمونه S3 با استفاده از سازوکار فعال سازی گرمایی مورد تحلیل قرار دادیم. پارامترهای انرژی متوسط جهش ها، فاصله متوسط جهش ها در گستره دمایی مورد بررسی و چگالی

ترازها در سطح فرمی برای نمونه S1 و S2 و برای نمونه S3 انرژی فعال سازی محاسبه شد. نمونه L را در دماهای پایین با استفاده از سازوکار جهش برد متغیر مات و در دمای بالا با استفاده از سازوکار فعال سازی گرمایی مورد بررسی قرار دادیم. مقادیر پارامترهای انرژی متوسط جهش ها، فاصله متوسط جهش ها در گستره دمایی مورد بررسی، چگالی ترازها در سطح فرمی و انرژی فعال سازی را بدست آورده ایم.

با مقایسه نمونه L و نمونه S1 می توان نتیجه گرفت که تغییر نوع زیر لایه باعث تغییر چگالی ترازها در سطح فرمی شده است. چگالی ترازها در سطح فرمی برای نمونه L بیشتر از نمونه S1 می باشد که این می تواند دلیلی بر افزایش رسانندگی نمونه L نسبت به نمونه S1 باشد و همچنین نشان دهنده حساس بودن ترکیبات لایه به نوع زیر لایه می باشد.

۳-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه‌های نازک CuO خالص (آلایش نشده) و

آلایش شده با Ru با استفاده از داده‌های مقاومت الکتریکی در گستره دمایی ۳۱۰

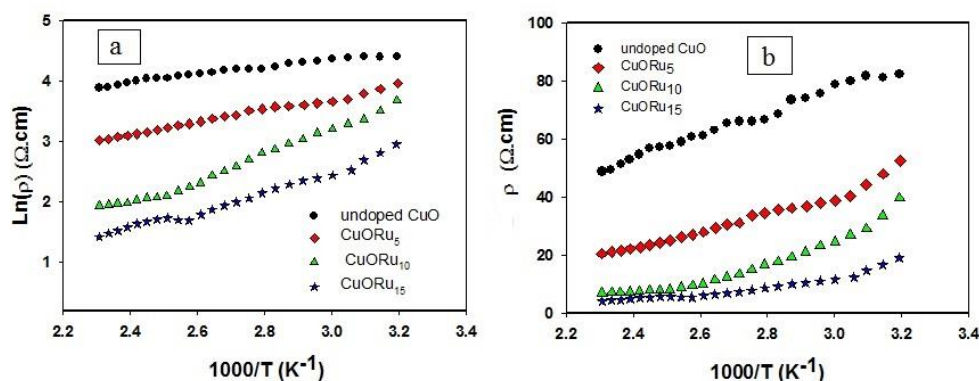
۴۳۰ K -

هدف ما در این تحقیق بررسی داده‌های تجربی شیخ و همکاران [۴۸] در خصوص نحوه وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی لایه‌های نازک CuO خالص و آلایش شده با روتینیوم (Ru) در گستره دمایی بالا، ۳۱۰ تا ۴۳۰ کلین، می‌باشد که با استفاده از محلول کلئیدی و به روش جانشانی دورانی^۱ بروی سطح فولاد لایه نشانی شده است. روش تهیه لایه به این صورت می‌باشد که ابتدا محلول کلئیدی CuO خالص (آلایش نشده) با حل g ۰/۰۵ استات مس در ۲۰ ml دی متیل فرمامید (DMF)^۲ باغلظت M ۰/۰۱۲۵ (محلول A) آماده شده و پس از آن در دمای °C ۱۲۰ برای ۲۰ دقیقه با همزدن مداوم با همزن مغناطیسی حرارت داده شده است. لایه نازک CuO آلایش نشده بروی سطح فولاد با روش جانشانی دورانی با سرعت چرخش ۳۰۰۰ rpm لایه نشانی شده است. محلول کلئیدی CuO آلایش شده Ru با حل g ۰/۲۸ کلرید روتینیوم (RuCl₂·6H₂O) در ۲۰ ml دی متیل فرمامید (DMF) به شکل M ۰/۰۱۲۵ (محلول B) آماده شده است. درصد حجمی (۵، ۱۰ و ۱۵) محلول B در محلول A مخلوط شد. محلول یکنواخت کلئیدی CuO آلایش شده با Ru بعد از ۲۰ دقیقه آماده شد و سپس این محلول را در دمای °C ۱۲۰ برای ۲۰ دقیقه با همزدن مداوم با همزن مغناطیسی حرارت داده اند. فیلم های CuO آلایش شده با Ru بروی سطح فولاد با روش جانشانی دورانی با سرعت چرخش ۳۰۰۰ rpm لایه نشانی شده است که نمونه ها به ترتیب CuORu5، CuORu10 و CuORu15 نامگذاری شده‌اند.

¹ spin coating

² Dimethylformamide (DMF)

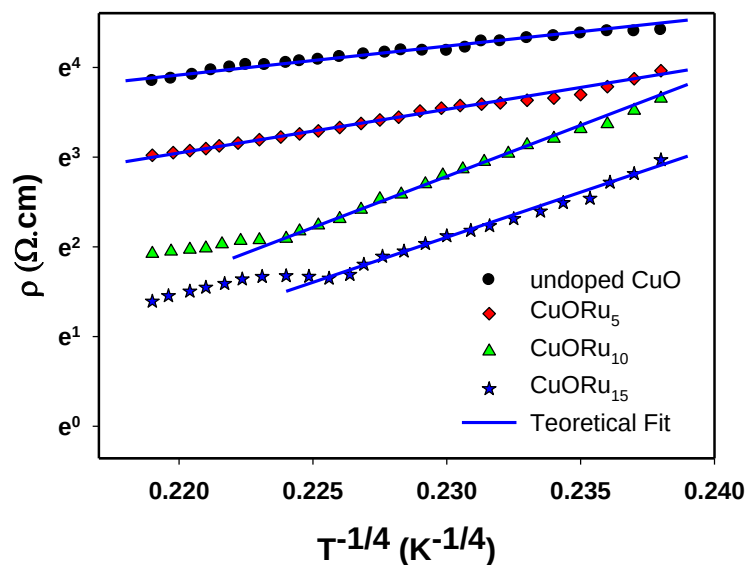
شکل ۳-۱۰ وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی ($\ln(\rho)$) لایه های نازک CuO آلاینش نشده و آلاینش شده با Ru را در گستره دمایی ۳۱۰ تا ۴۳۰ K نشان می دهد. چنانچه پیداست مقاومت الکتریکی همه نمونه ها با افزایش دما کاهش می یابد که تاییدی بر خاصیت نیمرسانایی در این لایه هاست. برای تحلیل این داده ها از دو سازوکار بهره برده ایم. این دو سازوکار عبارتند از سازوکار فعال سازی گرمایی که در آن از معادله آرنوس استفاده می شود و سازوکار دیگر وابسته به ترابری حامل ها از طریق جهش برد متغیر مات. با توجه به تغییرات شیب داده ها در برخی نمونه ها برای تحلیل آنها گستره دمایی را به دو ناحیه تقسیم بندی کرده ایم. ناحیه را به ناحیه دمایی پایین (۳۷۰ K-۳۱۰) و ناحیه دمایی بالا (۴۳۰ K-۳۷۰).



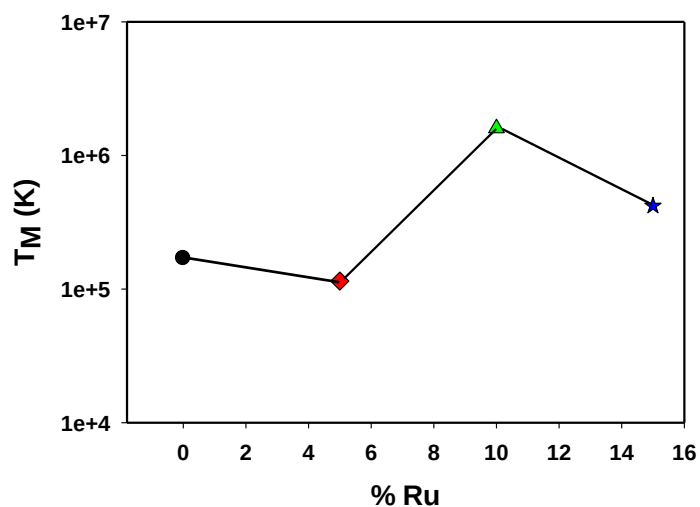
شکل ۳-۱۰: (الف) لگاریتم مقاومت الکتریکی و (ب) مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در لایه های نازک CuO خالص و آلاینش یافته با Ru [۴۸].

با فرض صحت نظریه MVRH نمونه های مورد مطالعه در ناحیه دمایی پایین ، با برازش داده ها در این معادله که انتظار می رود $\ln(\rho)$ با دما به صورت خطی بر حسب $T^{-1/4}$ تغییر یابد به کمک شیب

مقدار پارامتر T_M را بدست آوریم. تحلیل انجام شده در شکل ۱۱-۳ و نتایج بدست آمده مربوط به پارامتر T_M در شکل ۱۲-۳ ارائه گردیده است.

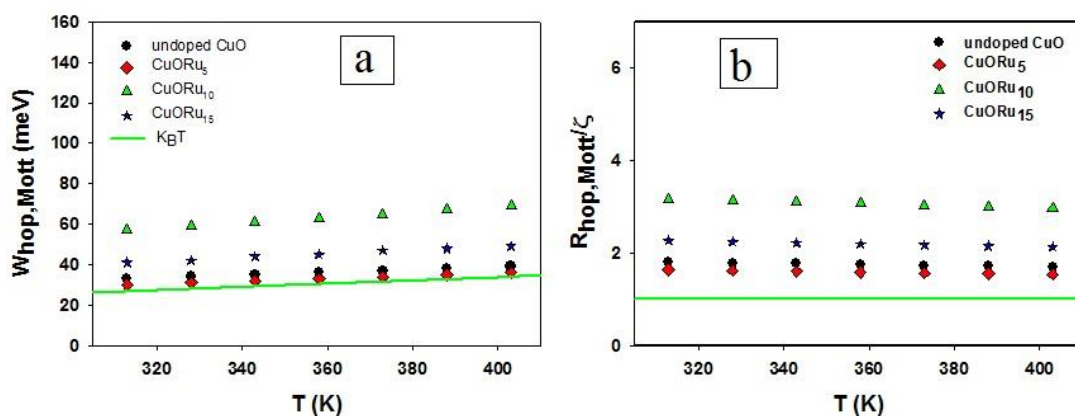


شکل ۱۱-۳: تغییرات ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های CuO آلاینش نشده و آلاینش یافته با Ru با درصدهای متفاوت. خطوط سیاه نشانگر پیش بینی نظری برازش شده در داده ها مبتنی بر نظریه MVRH می باشد.



شکل ۱۲-۳: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلاینش Ru.

با معلوم شدن مقادیر T_M در نمونه‌ها (شکل ۳-۱۲) و قرار دادن آن در معادلات ۱-۷ و ۱-۱۰ میانگین انرژی جهش‌ها و فاصله متوسط جهش‌ها محاسبه گردید. اکنون با معلوم شدن این نتایج به بررسی شرط‌های لازم (معادلات ۱-۱۲ و ۱-۱۳) جهت تحقق نظریه جهشی حاملها پرداخته‌ایم. شکل ۳-۱۳ الف و ب بترتیب تغییرات $\bar{W}_{hop}$ و نیز $\bar{R}_{hop} / \zeta$ را بر حسب دما نشان می‌دهد (مقدار ζ برای لایه‌های نازک CuO برابر با 0.167 nm گزارش شده است [۱۰]). مقادیر تغییرات مربوط $\bar{W}_{hop, Mott}$ و $\bar{R}_{hop, Mott}$ در گستره دمایی ۳۱۰ K-۳۷۰ در ستون‌های ۳ و ۴ در جدول ۲-۳ ارائه گردیده است.



شکل ۳-۱۳: تغییرات الف) $\bar{W}_{hop, Mott}$ و ب) $\bar{R}_{hop, Mott} / \zeta$ بر حسب T برای نمونه‌های CuO آلاینش نشده و آلاینش یافته با Ru با درصد‌های ۵، ۱۰ و ۱۵.

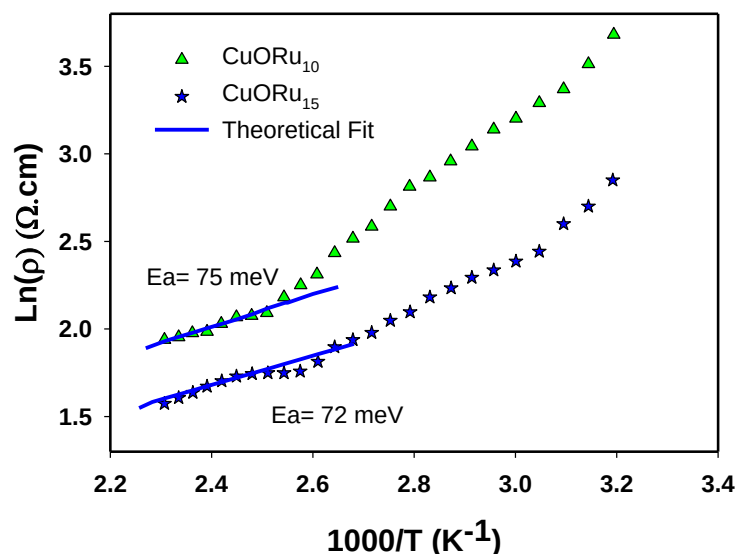
چنانچه پیداست نمونه‌های خالص (آلاینش نشده)، CuORu₅، CuORu₁₀ و CuORu₁₅ بخوبی در شرایط وابسته به وقوع ترابری جهشی پیروی کرده‌اند. با توجه به صادق بودن تحلیل جهشی حاملها در این نمونه‌ها می‌توان تراکم حامل‌های انرژی در تراز فرمی ($N(E_F)$) را با استفاده از معادله ۱-۹ بدست آورد. نتایج بدست آمده در جدول ۲-۳ گزارش شده است.

جدول ۲-۳: $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، مقادیر T_M و $N(E_F)$ در نمونه‌های CuO آلايش شده Ru.

نمونه	T_M (K)	$\bar{W}_{hop,Mott}$ (meV)	$\bar{R}_{hop,Mott}$ (nm)	$N(E_F)$ ($J^{-1}m^{-3}$)
Undoped CuO	$1/69 \times 10^5$	۳۷-۳۳	۰/۲۹-۰/۳۰	$1/68 \times 10^{48}$
CuORu ₅	$1/15 \times 10^5$	۳۳-۳۰	۰/۲۶-۰/۲۷	$2/43 \times 10^{48}$
CuORu ₁₀	$1/60 \times 10^6$	۶۵-۵۷	۰/۵۱-۰/۵۴	$1/75 \times 10^{47}$
CuORu ₁₅	$4/20 \times 10^5$	۴۶-۴۱	۰/۳۶-۰/۳۸	$6/67 \times 10^{47}$

با توجه به نتایج نشان داده شده در شکل ۳-۱۲، T_M با افزایش میزان درصد آلايش یک روند منظمی ندارد. از آنجا که T_M بر روی سایر پارامترهای جهش نیز تاثیر گذار است، افزایش دمای مشخصه T_M ، باعث افزایش میانگین انرژی جهش و کاهش چگالی ترازها و میانگین فاصله جهش ها می‌شود. این روند تغییرات را می‌توان در شکل ۳-۱۳ و همچنین جدول ۳-۲ به مشاهده کرد.

برای تحلیل داده ها در نمونه های CuORu₁₀ و CuORu₁₅ در ناحیه دمایی بالا از سازوکار انتقال فعال سازی گرمایی (معادله (۱-۱۴)) بهره برده ایم و انرژی فعال سازی وابسته را در هر یک از نمونه های مورد بررسی به روش برازش داده ها از طریق کمینه سازی مجموع مربعات تعیین نمودیم. تحلیل انجام شده در شکل ۳-۱۴ ارائه گردیده است.



شکل ۳-۱۴: نمودار تغییرات $\ln(\rho)$ بر حسب $1000/T$ در نمونه های برای نمونه های CuO آرایش یافته با Ru با درصد های ۱۰ و ۱۵٪، خط برازشی مبتنی بر نظریه آرنوس می باشد

انرژی فعال سازی برای نمونه CuORu_{10} و CuORu_{15} به ترتیب ۷۵ meV و ۷۲ meV بدست آمد که این انرژی ها مربوط به ترازهای ناخالصی کم عمق ایجاد شده در اثر آرایش Ru در بالای نوار ظرفیت می باشد. با افزایش ناخالصی Ru، انرژی فعال سازی کاهش می یابد وقوع این پدیده می تواند ناشی از جایگزینی اتم های روتینیوم بجای اتم مس در شبکه باشد. مقادیر بدست آمده با مقادیر جاندل و همکاران همخوانی دارد [۱۶] (۷۵-۹۰ meV). چنانچه از شکل ۳-۱۴ پیداست با اضافه شدن اتم های روتینیوم مقدار انرژی فعال سازی تراز کم عمق وابسته به برانگیختگی حامل ها در گستره دمایی بالا از ۷۵ meV به ۷۲ meV تغییر یافته است.

نتیجه گیری:

در این بخش وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی نمونه‌های CuO خالص و آلاینش شده با Ru که توسط شیخ و همکاران [۴۸] گزارش شده است مورد مطالعه قرار گرفت. لایه‌های مورد نظر با استفاده از محلول کلونیدی و به روش جانشانی دورانی بر روی سطح فولاد لایه نشانی شده‌اند. نمونه‌های CuO خالص و آلاینش شده با Ru را با استفاده از دو سازوکار جهش برد متغیر مات (MVRH) و فعال‌سازی گرمایی مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. پارامترهای انرژی متوسط جهش‌ها، فاصله متوسط جهش‌ها در گستره دمایی مورد بررسی و چگالی ترازها در سطح فرمی و انرژی فعال‌سازی تخمین زده شد

با مقایسه دو نمونه‌های CuO خالص و CuORu_5 مشاهده می‌شود چگالی ترازهای در سطح فرمی نمونه خالص نسبت به نمونه آلاینش شده، کمتر و انرژی متوسط جهش‌ها و فاصله متوسط جهش‌ها، بیشتر است که این می‌تواند دلیل رسانندگی بیشتر نمونه آلاینش شده نسبت به نمونه خالص باشد. همچنین با مقایسه دو نمونه CuORu_{10} و CuORu_{15} می‌توان رسانندگی بالای نمونه CuORu_{15} نسبت به CuORu_{10} را به بیشتر بودن چگالی ترازهای نمونه CuORu_{15} در سطح فرمی و کمتر بودن انرژی متوسط جهش‌ها و فاصله متوسط جهش‌های آن نسبت داد.

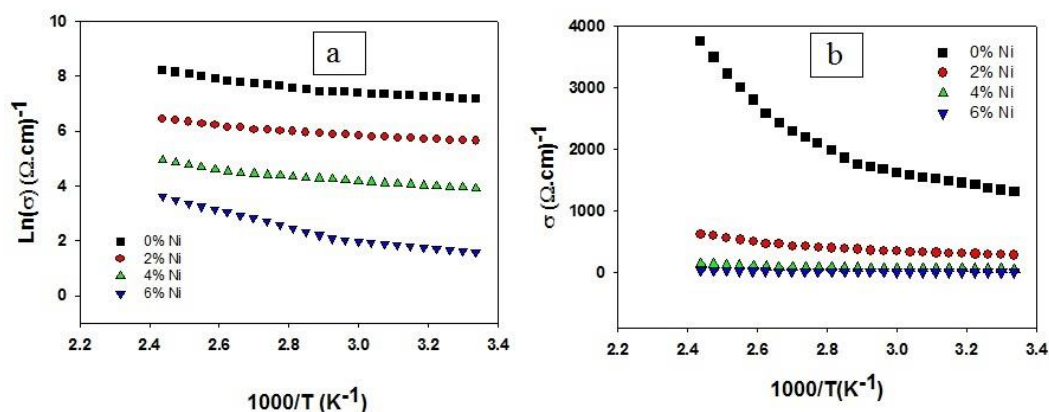
۴-۳ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه ZnO

در این بخش لایه نازک اکسید روی را به دو بخش تقسیم کرده ایم که در بخش اول (۳-۴-۱) و بخش دوم (۳-۴-۲) به بررسی لایه های نازک اکسید روی که با ناخالصی نیکل آلاینش شده می پردازیم.

۳-۴-۱ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه های نازک ZnO آلاینش شده با Ni تهیه شده به

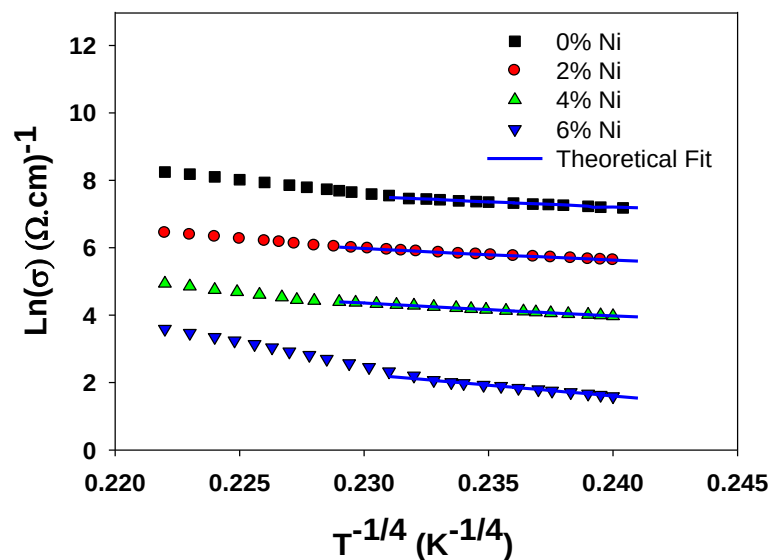
روش کندوپاش

هدف ما در این تحقیق بررسی داده های تجربی ساها و همکاران [۴۹] در خصوص نحوه وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی لایه های نازک ZnO خالص و آلاینش شده با نیکل با تراکم های ۲، ۴ و ۶ درصد اتمی در گستره دمایی (۳۰۰ تا ۴۱۰ K)، می باشد که بر روی شیشه به روش کندوپاش مگنترون در فرکانس رادیویی (RF) با استفاده از پلاسمای آرگون تهیه شده اند. شکل ۳-۱۵ وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی لایه های نازک ZnO خالص و آلاینش شده را نشان می دهد. رسانندگی الکتریکی لایه ها با آلاینش نیکل کاهش پیدا می کند.

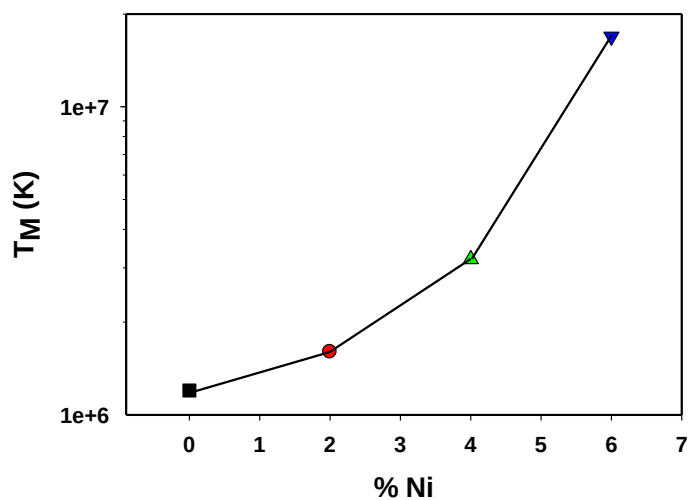


شکل ۳-۱۵: وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی در مقیاس های (الف) نیم لگاریتمی و (ب) خطی برای لایه های نازک ZnO خالص و آلاینش یافته با Ni [۴۹].

این داده ها حاکی از آن است که در هر کدام از نمونه ها با افزایش دما رسانندگی الکتریکی لایه رو به افزایش گذارده است که تاییدی بر خاصیت نیمرسانایی در این نمونه هاست. ما با توجه به شیب متفاوت این داده ها همچون چین چی لین [۷] برای تحلیل داده ها از دو سازوکار مختلف در دو بازه دمایی ۳۰۰ K-۳۶۰ و همچنین ۳۶۰ K-۴۰۰ استفاده کرده ایم. در دماهای بالاتر رسانندگی الکتریکی لایه های نازک ZnO خالص و آلایش شده به سازوکار رسانش فعال سازی گرمایی (TA) نسبت داده شده است و در دماهای پایین تر رسانندگی از طریق جهش برد متغیر (MVRH) بین حالت های جایگزیده با انرژی فعال سازی کمتر از E_a وابسته است. نخست با برازش داده ها از طریق معادله (۱-۵) انتظار می رود $\ln(\sigma)$ با دما به صورت $T^{-1/4}$ تغییر یابد. در این صورت به کمک شیب نمودار انطباق یافته می توان مقدار پارامتر T_M را بدست آوریم. تحلیل انجام شده شکل ۳-۱۶ و نتایج بدست آمده در شکل ۳-۱۷ ارائه گردیده است. لازم به ذکر آنکه مقادیر بدست آمده برای دمای مشخصه نمونه ها با مقدار گزارش شده توسط ساگار و همکاران [۵۰] برای لایه های نازک ZnO:Al ($4/97 \times 10^6 - 1/9 \times 10^5$ K) قابل قیاس می باشد. این نتایج حاکی از آن است که با افزایش درصد آلایش Ni ، T_M افزایش پیدا می کند. از آنجا که T_M روی سایر پارامترهای جهش تأثیرگذار است افزایش دمای مشخصه T_M ، منجر به افزایش میانگین انرژی جهش و کاهش چگالی ترازها در سطح فرمی و میانگین فاصله جهش ها می شود.



شکل ۳-۱۶: تغییرات $\text{Ln}(\sigma)$ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های ZnO خالص و آلیش یافته با Ni به همراه خط برازشی مبتنی بر نظریه MVRH در هر کدام از نمونه ها.

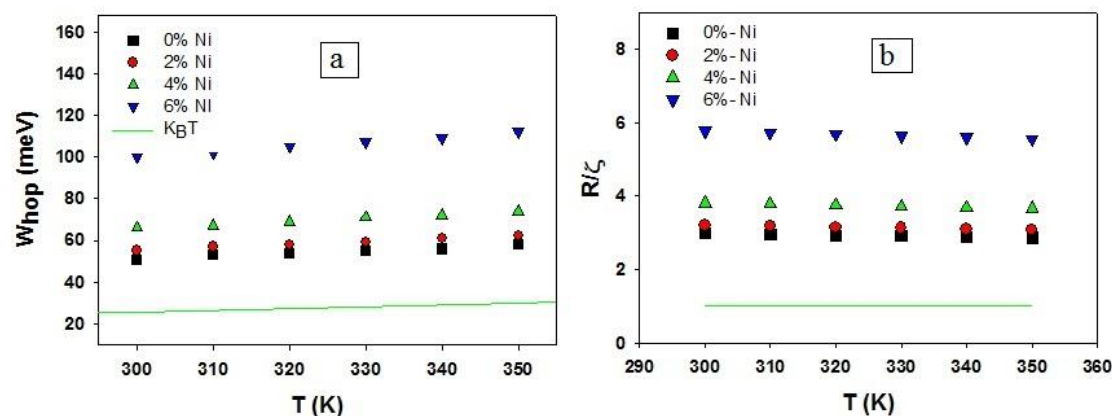


شکل ۳-۱۷: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلیش Ni.

با معلوم شدن مقادیر T_M در این نمونه ها (شکل ۳-۱۷) و قرار دادن آن در معادلات ۱-۷ و ۱-۱۰

می توان میانگین انرژی جهش ها و فاصله متوسط جهش ها را محاسبه کرد. اکنون با معلوم شدن این

نتایج به بررسی شرط‌های لازم (معادلات ۱۲-۱ و ۱۳-۱) جهت تحقق نظریه جهشی حاملها پرداخته‌ایم. شکل ۱۸-۳ الف و ب بترتیب تغییرات $\bar{W}_{hop}$ و $\bar{R}_{hop} / \zeta$ را بر حسب دما نشان می‌دهد (مقدار ζ برای لایه‌های نازک ZnO در حدود ۲ nm گزارش شده است [۷]). همانطور که در این شکل پیداست همه‌ی نمونه‌ها شرط‌های لازم برای صدق نظریه MVRH را در گستره دمایی ۳۰۰ K-۳۶۰ K برآورده کرده‌اند. اکنون با توجه به صدق نظریه رسانایی جهشی الکترونی در این نمونه‌ها با استفاده از معادله ۹-۱ به تعیین تخمینی از تراکم حالت‌ها در محل تراز فرمی ($N(E_F)$) پرداخته‌ایم. نتایج این محاسبات در جدول ۳-۳ ارائه گردیده است. مقادیر تغییرات مربوط $\bar{W}_{hop, Mott}$ و $\bar{R}_{hop, Mott}$ در گستره دمایی ۳۰۰ K-۳۶۰ K در ستون‌های ۳ و ۴ در جدول ۳-۳ ارائه گردیده است.



شکل ۱۸-۳: تغییرات الف) $\bar{W}_{hop, Mott}$ و ب) $\bar{R}_{hop, Mott} / \zeta$ بر حسب دما برای نمونه‌های ZnO خالص و آلاش شده با Ni در گستره دمایی ۳۰۰ K-۳۶۰ K.

جدول ۳-۳: مقادیر $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، مقادیر T_M و $N(E_F)$ ، در گستره دمایی داده های گزارش شده.

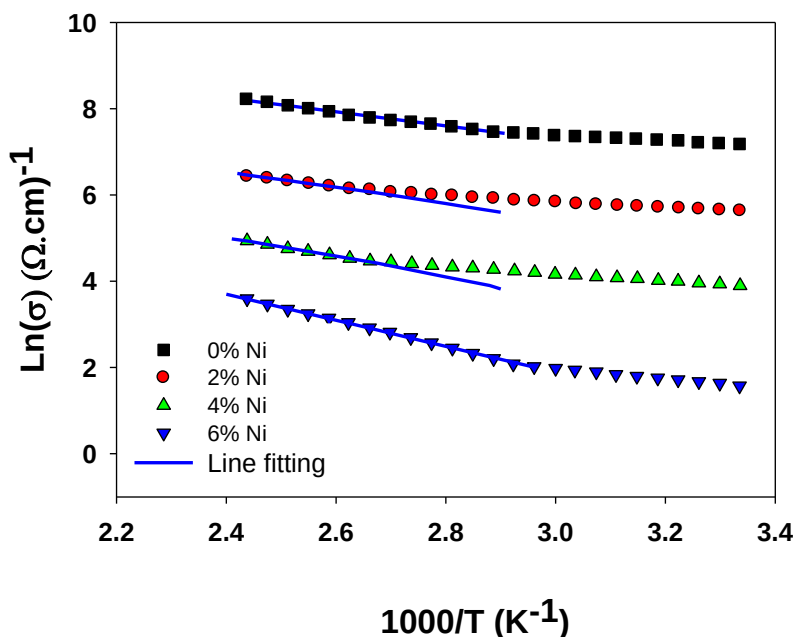
نمونه	$T_M \times 10^4$ (K)	$\bar{W}_{hop,Mott}$ (meV)	$\bar{R}_{hop,Mott}$ (nm)	$N(E_F)$ ($J^{-1}m^{-3}$)
ZnO (pure)	۱/۲۰	۵۸-۵۱	۵/۹۶-۵/۷۴	$۱/۳۶ \times 10^{۴۴}$
ZnO/Ni 2%	۱/۶۰	۶۲-۵۵	۶/۱۶-۶/۴۱	$۱/۰۲ \times 10^{۴۴}$
ZnO/Ni 4%	۳/۲۰	۷۴-۶۶	۷/۳۳-۷/۶۲	$۵/۰۹ \times 10^{۴۳}$
ZnO/Ni 6%	۱۶/۹	۱۱۲-۱۰۰	۱۱/۱۲-۱۱/۵۵	$۹/۶۰ \times 10^{۴۲}$

با توجه به شکل ۳-۱۸-الف مشاهده می شود که با افزایش دما انرژی جهش ها افزایش می یابد. این تغییرات برای نمونه ها در بازه ۵۱-۱۲۶ meV می باشد. با افزایش دما انتظار می رود با توجه به افزایش تراکم فونون های شبکه و در نتیجه افزایش احتمال پراکندگی حامل ها فاصله جهش ها (شکل ۳-۱۸-ب) کاهش یابد. تغییرات متوسط فاصله جهش ها برای نمونه ها در بازه ۵/۵-۱۱/۵ nm می باشد.

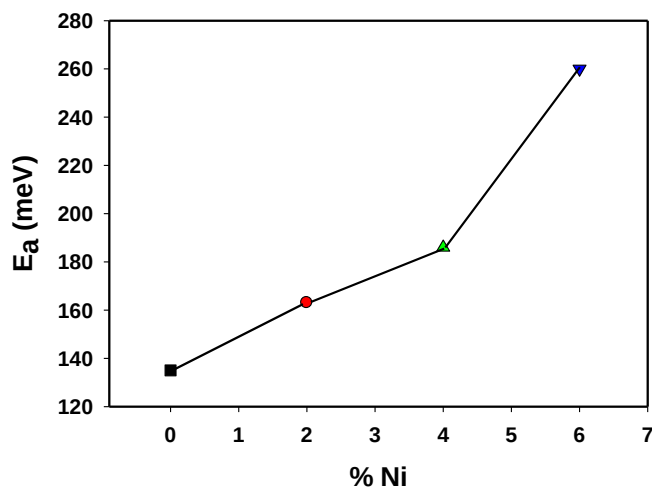
E_a انرژی فعال سازی مربوط به ترازهای عمیق در گاف نواری ماده هستند. الکترون های جایگزیده در این ترازها با افزایش دما به نوار رسانش برانگیخته شده و در رسانندگی مشارکت می کنند. به منظور یافتن موقعیت این ترازها و با کمک گرفتن از معادله (۱-۱۴) در محدوده دمایی بالا (۳۶۰-۴۰۰ K)، انرژی فعال سازی وابسته را در هر یک از نمونه های مورد بررسی به روش برازش داده ها از طریق کمینه سازی مجموع مربعات تعیین شده است. تحلیل انجام شده در شکل ۳-۱۹ و نتایج بدست آمده در شکل ۳-۲۰ نشان داده شده است. این ترازها (کم عمق) می تواند عمدتاً متأثر از حضور ناکاملی های بلوری ناشی از تهیجای اکسیژن و اتم های درون شبکه ای Zn باشد. لازم به ذکر است که برای نمونه خالص

مقادیر بدست آمده برای انرژی های فعال سازی در ناحیه دمایی ۲ بخوبی با مقادیر گزارش شده توسط چین چی لین و همکاران [۷] (۱۱۳-۱۳۵ meV) مطابقت دارد.

کاهش تراکم الکترون های آزاد بر اثر جایگزینی اتم های نیکل بجای تهیجهای اکسیژن در شبکه باشد [۵۱ و ۵۲]. این جایگزینی می تواند از نقش این مراکز به عنوان ترازهای بخشنده الکترونی جلوگیری کرده و در نتیجه از تراکم الکترون های آزاد در ماده بکاهد. چنانچه از شکل ۳-۲۰ پیداست با اضافه شدن اتم های نیکل مقدار انرژی فعال سازی تراز عمیق وابسته به برانگیختگی حامل ها در ناحیه دمایی ۲ (گستره دمایی بالا) از حدود ۱۳۵ meV به ۱۶۳ - ۲۶۰ meV تغییر یافته است که می تواند نشانگر حضور تراز این ناخالصی افزوده شده باشد.



شکل ۳-۱۹: نمودار تغییرات $\ln(\sigma)$ بر حسب $1000/T$ در نمونه های ZnO خالص و آلاش شده با Ni.



شکل ۳-۲۰: تغییرات انرژی فعال سازی بر حسب درصد آلیش Ni.

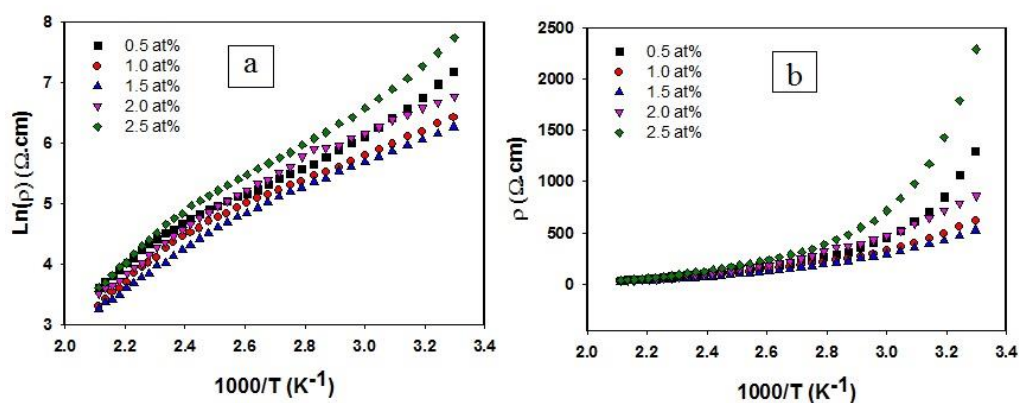
۳-۴-۲ مطالعه نظری خواص الکترونیکی لایه‌های نازک ZnO آلیش شده با ۰/۵-۲/۵ % Ni

تهیه شده به روش اسپری پایرولیز

هدف ما در این تحقیق بررسی داده های تجربی پاتیل و همکاران [۵۳] در خصوص نحوه وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی فیلم ZnO آلیش شده با Ni در گستره دمایی، ۳۰۰ تا ۴۷۰ K، می باشد که بر روی شیشه در دمای 400°C به روش تجزیه حرارتی اسپری^۱ و با استفاده از استات روی و نیکل نیترات ($\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) به عنوان ماده آلاینده با درصدهای [Ni/Zn] ۰/۵، ۱/۰، ۱/۵، ۲/۰ و ۲/۵ لایه نشانی شده است. روش تهیه لایه‌ها به این صورت است که لایه‌های ZnO به روش اسپری بروی سطوح شیشه با استفاده از محلول استات روی ۰/۱ M ($\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) با آهنگ ۵ ml/min رشد داده شده است.

^۱ spray pyrolysis

در این تحقیق مقاومت الکتریکی نمونه‌ها به روش دو پایانه‌ای^۱ برحسب تابعی از دما اندازه‌گیری شده است. شکل ۳-۲۱ وابستگی دمایی مقاومت الکتریکی لایه ZnO آلوده شده با Ni با درصدی اتمی ۰/۵، ۱/۰، ۱/۵، ۲/۰ و ۲/۵ را در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۴۷۰ K نشان می‌دهد. مقاومت الکتریکی این لایه‌ها با آلودگی Ni تا میزان ۱/۵٪ کاهش و برای درصدی بالاتر افزایش می‌یابد. پاتیل و همکاران این افزایش را به تولید مرزدانه‌ها در اثر آلودگی نیکل نسبت داده‌اند.



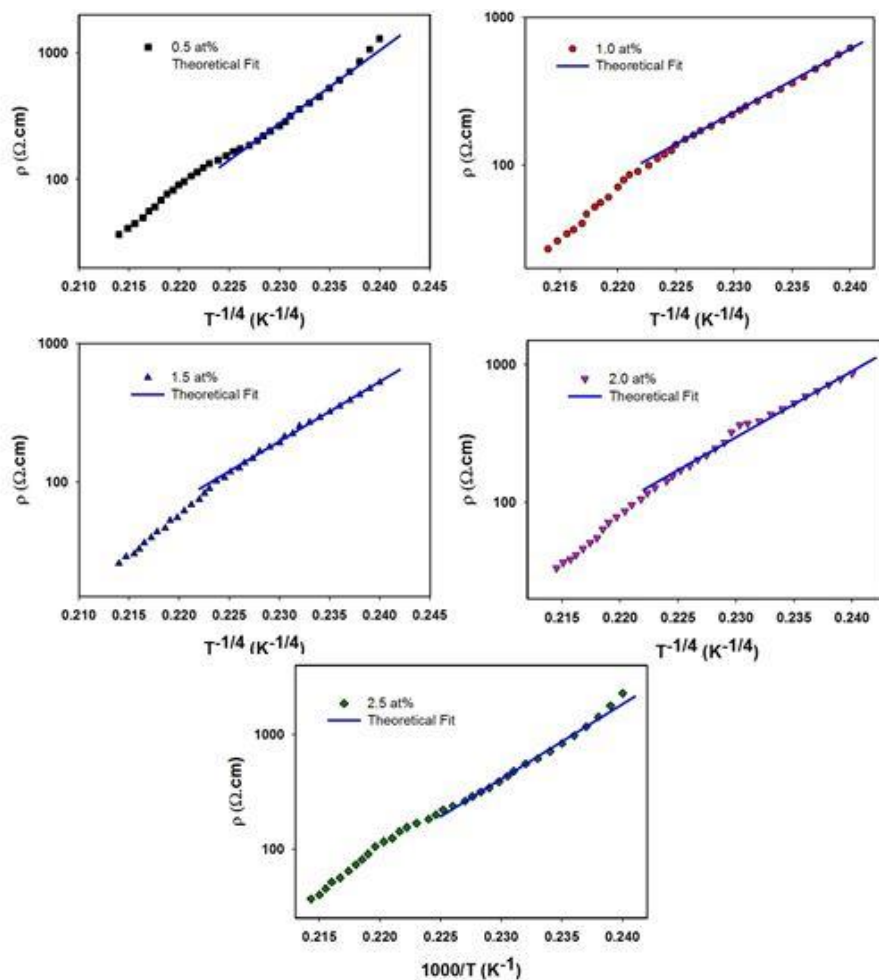
شکل ۳-۲۱: الف) وابستگی دمایی لگاریتم مقاومت الکتریکی (ب) مقاومت الکتریکی بر حسب عکس دما در لایه‌های نازک ZnO آلوده شده با Ni با درصدی متفاوت [۵۳].

کاهش در مقاومت الکتریکی DC با افزایش دما رفتار نیمه هادی فیلم‌های نازک NZO را تایید میکند. در این مقاله پاتیل و همکاران داده‌های رسانندگی را با استفاده از سازوکار انتقال فعال سازی گرمایی ترازهای جایگزین الکترونی تحلیل کرده‌اند که انرژی فعال سازی با افزایش غلظت Ni تا ۱/۵٪ کاهش نشان داده که کمترین مقدار ۰/۲۹۷۹ eV و سپس افزایش می‌یابد. پاتیل و همکاران در گزارش خود این تغییرات را متناظر با تغییر در ابعاد دانه‌ها نسبت داده‌اند.

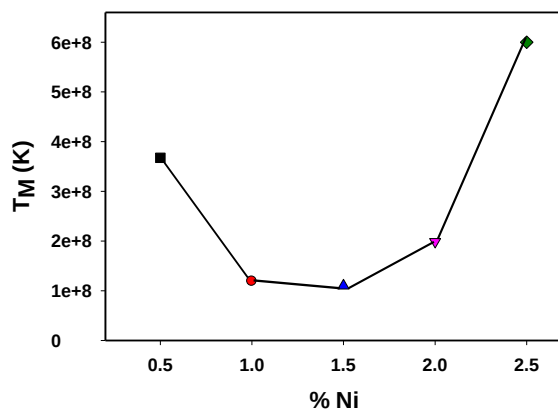
¹ two probe method

با توجه به داده‌های گزارش شده شکل ۳-۲۱ دو ناحیه ($400\text{ K}-300\text{ K}$ و $470\text{ K}-400\text{ K}$) با شیب‌ها مختلف ملاحظه می‌شود. ما با مقایسه با مقاله رامبو و همکاران که در فصل ۱ به آن اشاره شده است برآن شدیم که داده‌ها تجربی پاتیل و همکاران را در ناحیه دمای پایین ($400\text{ K}-300\text{ K}$) با استفاده از سازوکار MVRH و در ناحیه دمای بالا ($470\text{ K}-400\text{ K}$) با استفاده از سازوکار فعال سازی گرمایی تحلیل کنیم.

با فرض صحت نظریه VRH نمونه‌های مورد مطالعه در ناحیه دمایی پایین، با برآزش داده‌ها با معادله ۱-۵ انتظار می‌رود $\ln(\rho)$ با دما به صورت $T^{-1/4}$ تغییر یابد. آنگاه به کمک شیب نمودار مقدار پارامتر T_M را بدست آوریم. تحلیل انجام شده در شکل ۳-۲۲ و نتایج بدست آمده برای T_M در شکل ۳-۲۳ ارائه گردیده است. لازم به ذکر آنکه مقادیر بدست آمده برای دمای مشخصه نمونه‌ها با مقادیر گزارش شده توسط رامبو و همکاران [۹] که در بخش ۲-۵-۱ بحث شد برای لایه‌های نازک ZnO:Fe ($6/35 \times 10^8 - 3/28 \times 10^9\text{ K}$) قابل قیاس می‌باشد.

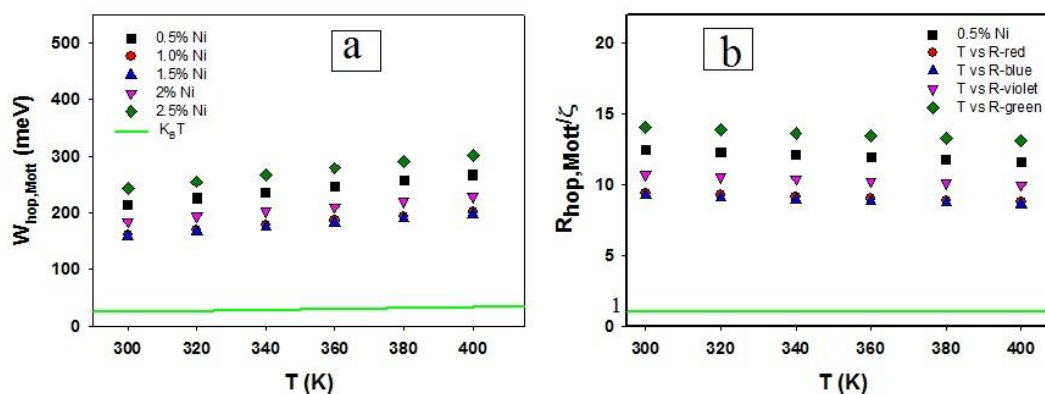


شکل ۳-۲۲: تغییرات ρ بر حسب $T^{-1/4}$ برای نمونه های ZnO آلیش یافته با Ni. خط ممتد نشانگر خط برازشی مبتنی بر نظریه MVRH می باشد.



شکل ۳-۲۳: تغییرات دمای مشخصه T_M بر حسب درصد آلیش Ni.

با معلوم شدن مقادیر T_M در نمونه‌ها (شکل ۳-۲۳) و قرار دادن آن در معادلات ۱-۷ و ۱-۱۰ میانگین انرژی جهش‌ها و فاصله متوسط جهش‌ها محاسبه گردید. اکنون با معلوم شدن این نتایج به بررسی شرط‌های لازم (معادلات ۱-۱۲ و ۱-۱۳) جهت تحقق نظریه جهشی حاملها پرداخته‌ایم. شکل ۳-۲۴ الف و ب بترتیب تغییرات $\bar{W}_{hop}$ و $\bar{R}_{hop} / \zeta$ را بر حسب دما نشان می‌دهد (مقدار ζ برای لایه‌های نازک ZnO در حدود ۲ nm گزارش شده است [۷]). مقادیر تغییرات مربوط $\bar{W}_{hop}$ و $\bar{R}_{hop}$ در گستره دمایی ۳۰۰ K-۴۰۰ K در ستون‌های ۳ و ۴ در جدول ۳-۴ ارائه گردیده است.



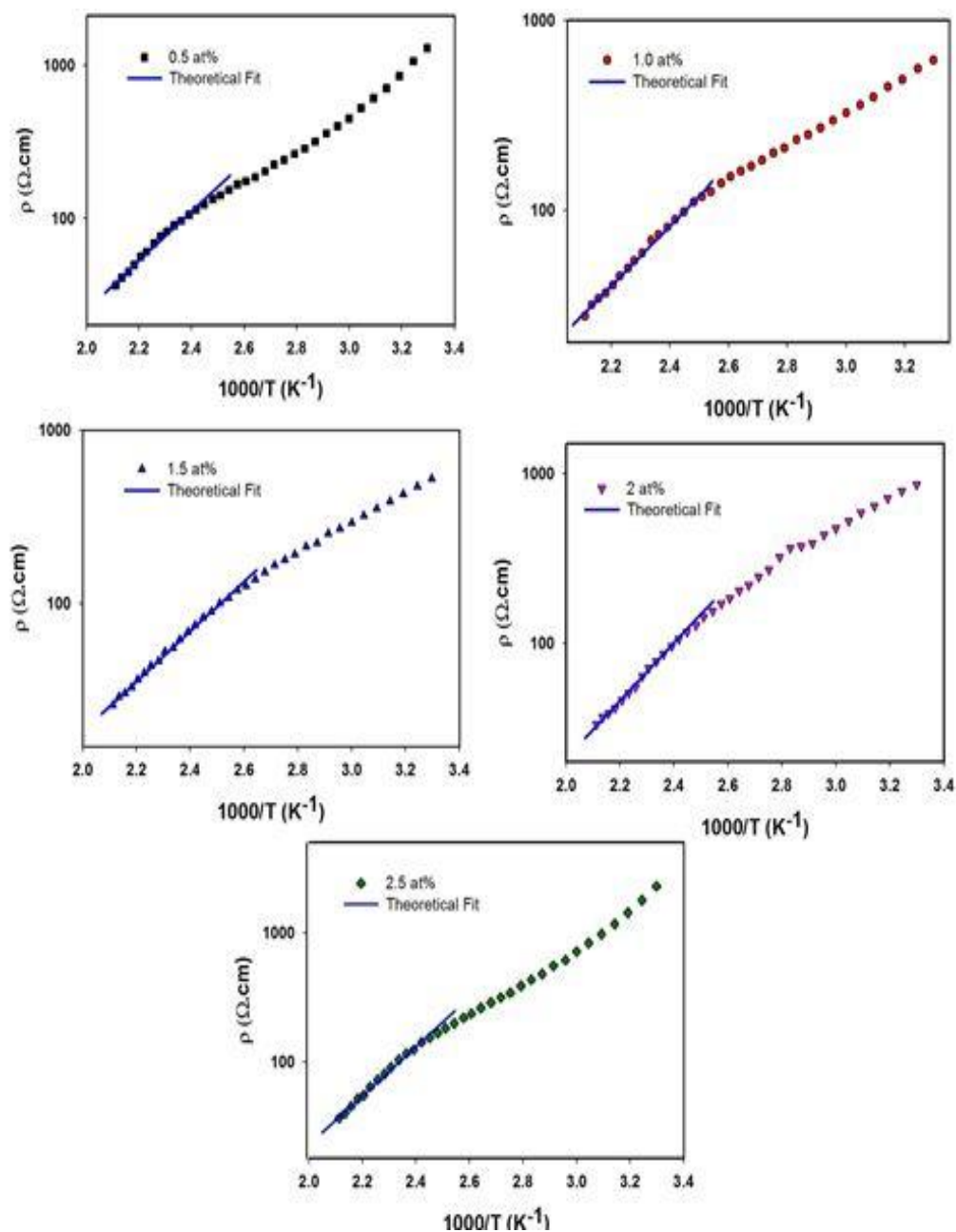
شکل ۳-۲۴: تغییرات الف) $W_{hop,Mott}$ و ب) $R_{hop,Mott} / \zeta$ بر حسب T برای نمونه‌های ZnO آلوده شده با Ni.

همانطور که از شکل ۳-۲۴ الف و ب مشاهده می‌شود همه‌ی نمونه‌ها شرایط لازم برای صدق نظریه MVRH برآورده کرده‌اند. اکنون با توجه به صدق نظریه رسانایی جهشی الکترونی در این نمونه‌ها با استفاده از معادله ۱-۹ به تعیین تخمینی از تراکم حالت‌ها در محل تراز فرمی ($N(E_F)$) پرداختیم که نتایج این محاسبات در جدول ۳-۴ ارائه گردیده است.

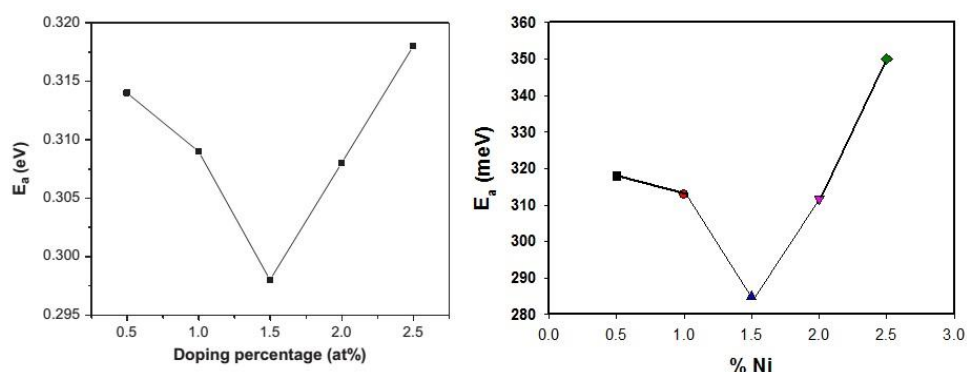
جدول ۳-۴: مقادیر $\bar{W}_{hop,Mott}$ ، $\bar{R}_{hop,Mott}$ ، T_M و $N(E_F)$ در گستره دمایی ۳۰۰ K-۴۰۰.

نمونه	$T_M \times 10^4$ (K)	$\bar{W}_{hop,Mott}$ (meV)	$\bar{R}_{hop,Mott}$ (nm)	$N(E_F) \times 10^{21}$ (J ⁻¹ m ⁻³)
ZnO/Ni 0.5%	۳/۶۷	۲۶۷-۲۱۵	۲۳/۲۲-۲۴/۹۵	۹/۰۶
ZnO/Ni 1.0%	۱/۱۹	۲۰۱-۱۶۲	۱۷/۶۰-۱۸/۸۲	۱۳/۷
ZnO/Ni 1.5%	۱/۱۰	۱۹۷-۱۵۹	۱۸/۱۷-۱۸/۴۶	۱۴/۸
ZnO/Ni 2.0%	۱/۹۹	۲۲۹-۱۸۴	۱۹/۲۰-۲۱/۴۰	۸/۱۹
ZnO/Ni 2.5%	۶/۰۰	۳۰۲-۲۴۳	۲۶/۲۵-۲۸/۲۰	۲/۷۲

چنانچه اشاره شد در محدوده دمایی (۴۰۰ K-۴۷۰) ما از سازوکار رسانش از طریق فعال‌سازی (نظریه آرنیوس معادله (۱-۱۴)) استفاده کرده‌ایم. انرژی فعال‌سازی وابسته را در هر یک از نمونه‌های مورد بررسی به روش برازش داده‌ها از طریق کمینه‌سازی مجموع مربعات تعیین نمودیم. نتایج بدست آمده در شکل ۳-۲۶ و منحنی وابسته در شکل ۳-۲۵ نشان داده شده است.



شکل ۳-۲۵: تغییرات ρ بر حسب $1000/T$ در فیلم های ZnO آلايش یافته با Ni که در آن خط آبی، خط برازشی مبتنی بر نظریه آرنوس می باشد.



شکل ۳-۲۶: تغییرات انرژی فعال سازی گرمایی الف) تحلیل شده توسط پاتیل و همکاران [۵۴] و ب) تحلیل ما در لایه‌های نازک ZnO بر حسب درصد آلیش Ni.

همانطور که از شکل ۳-۲۶ پیداست انرژی فعال سازی برای فیلم های اکسید روی آلیش شده با نیکل با درصد های ۰/۵ تا ۱/۵٪ کاهش برای درصدهای بالاتر افزایش پیدا می کند که این تغییرات متناظر با تغییرات ابعاد بلور می باشد.

نتیجه گیری:

ما با تحلیل داده های وابستگی دمایی رسانندگی الکتریکی اکسید روی آلیش شده با Ni گزارش شده توسط ساها و همکاران [۴۹] با میزان آلیش ۲ تا ۶ درصد اتمی در بازه دمایی ۳۰۰ K-۴۱۰ و پاتیل و همکاران [۵۳] با میزان آلیش ۰/۵ تا ۲/۵ درصد اتمی در بازه دمایی ۳۰۰ K-۴۷۰ دریافتیم که رسانندگی در دماهای پایین (دماهای کمتر از ۴۰۰ K) از طریق جهش الکترون ها در ترازهای ناخالصی در زیر نوار رسانش صورت می گیرد که با استفاده از سازوکار MVRH انرژی متوسط جهش ها، فاصله متوسط جهش ها و چگالی ترازها در سطح فرمی را تخمین زده ایم.

با مقایسه نتایج بدست آمده برای لایه های ZnO آلیش شده به میزان ۲٪ نیکل که توسط پاتیل با استفاده از روش اسپری و ساها با استفاده از روش کندوپاش بر روی سطح شیشه لایه نشانی شده است

مشاهده می شود که، در نمونه تهیه شده به روش کندوپاش در مقایسه با نمونه تهیه شده به روش اسپری پیرولیز چگالی ترازها در سطح فرمی بیشتر و انرژی جهش ها و فاصله متوسط جهش ها کمتر میباشد که این می تواند دلیلی بر رسانندگی بالای نمونه ساها و مهم بودن روش لایه نشانی باشد.

در ناحیه دمایی بالا (بالاتر از 400 K) با استفاده از سازوکار فعال سازی گرمایی آرنیوس، انرژی فعال سازی مربوط به ترازهای عمیق ایجاد شده (بدلیل آلیش Ni) در پایین نوار رسانش را بدست آوردیم. مقدار انرژی فعال سازی برای داده های ساها و همکاران $135\text{ meV}-260\text{ meV}$ و مقدار انرژی فعال سازی برای داده های پاتیل و همکاران $285\text{ meV}-376\text{ meV}$ بدست آمد.

پیشنهادهات

۱-تحقیق در مطالعه سازوکارهای رسانندگی الکتریکی در لایه‌های نازک در سایر مواد اکسید فلزی

نظیر MoO_3 ، NiO ، WO_3 و ...

۲- تحقیق در مطالعه سازوکارهای رسانندگی الکتریکی در لایه‌های نازک نیمرسانای غیر اکسیدی نظیر

ZnS ، GaN ، CNT و ...

[1] John Allison, **1971**, " **Electronic Engineering Semiconductors and devices**", McGraw-Hill Book Company, Shoppenhangers Rd Maidenhead Berkshire England.

[2] S. M. Sze, **1969**, "**Physics of Semiconductor Devices**.", Wiley-Interscience, New York.

[۳] اس.ام. زی، ۱۳۷۵، " فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا"، غلامحسین سدید عاملی، چاپ اول، دانشگاه امام رضا (ع)، مشهد، ۶۲۸ ص.

[۴] جاسپریت سینگ، ۱۳۸۱، "(مقدمه‌ای بر افزاره‌های نیمه‌هادی) فیزیک الکترونیک"، مرتضی فتحی‌پور، علیرضا احسانی اردکانی، چاپ اول، مؤسسات انتشارات و چاپ دانشگاه تهران، تهران، ۸۲۴ ص.

[5] P. R. Patil, and P. S. Patil. (2001), "**Preparation of mixed oxide MoO₃–WO₃ thin film by spray pyrolysis technique and their characterisation.**", *Thin Solid Films* 382, no. 1 13-22.

[6] Yildiz, A., S. B. Lisesivdin, M. Kasap, and D. Mardare, (2009), "**Non-adiabatic small polaron hopping conduction in Nb-doped TiO₂ thin film.**", *Physica B: Condensed Matter* 404, no. 8 1423-1426.

[7] C.C. Lien, C.Y. Wu, Z.Q. Li, and J. J. Lin, (2011), "**Electrical conduction processes in ZnO in a wide temperature range 20–500 K.**", *Journal of Applied Physics*, 110, no. 6, 063706.

[8] P. Biswas, S. Kundu, and P. Banerji, (2013), "**A study on electrical transport vis-à-vis the effect of thermal annealing on the p-type conductivity in arsenic-doped MOCVD grown ZnO in the temperature range 10–300K.**", *Journal of Alloys and Compounds*, 552 304-309.

- [9] A. P. Rambu, V. Nica, and M. Dobromir, (2013), **"Influence of Fe-doping on the optical and electrical properties of ZnO films."**, *Superlattices and Microstructures*, 59 87-96.
- [10] T. Serin, S. Gurakar, H. Ot, A. Yildiz, and N. Serin, (2015) **"Influence of oxygen flow rate in CuO."**, *Applied Surface Science*.
- [11] Sun, Young, Xiaojun Xu, and Yuheng Zhang, (2000), **"Effects of Fe doping in La 0.67 Sr 0.33 CoO 3."**, *Physical Review B*, 62, no. 9, 5289.
- [12] K. X. Jin, H. Li, J. Y. Wang, X. Y. Tan, S. G. Zhao, and C. L. Chen, (2012), **"Crossover of magnetoresistance from positive to negative in La 0.5 Sr 0.5 CoO 3– σ /Si heterostructure"**, *Thin Solid Films*, 520, no. 13, 4493-4496.
- [13] Fahrettin, Yakuphanoglu, (2009), **"Electrical conductivity, Seebeck coefficient and optical properties of SnO₂ film deposited on ITO by dip coating."**, , *Journal of Alloys and Compounds* 470, no. 1, 55-59.
- [14] R. Mariappan., V. Ponnuswamy, P. Suresh, R. Suresh, M. Ragavendar, and C. Sankar, (2013), **"Deposition and characterization of pure and Cd doped SnO₂ thin films by the nebulizer spray pyrolysis (NSP) technique."**, *Materials Science in Semiconductor Processing* 16, no. 3, 825-832.
- [15] Shikha, Bansal, Dinesh K. Pandya, and Subhash C. Kashyap, (2012), **"Charge transport mechanism in high conductivity undoped tin oxide thin films deposited by reactive sputtering."**, *Thin Solid Films* 524, 30-34.
- [16] D. M. Jundale, S. G. Pawar, S. L. Patil, M. A. Chougule, P. R. Godse, and V. B. Patil, 2011, **"Effect of annealing on structure, morphology and optoelectronic properties of nanocrystalline CuO thin films."**, In *OPTICS: PHENOMENA, MATERIALS, DEVICES, AND CHARACTERIZATION: OPTICS 2011: International Conference on Light*, vol. 1391, no. 1, pp. 573-575. AIP Publishing.

[۱۷] ع. رازقی زاده، ۱۳۸۸، "فیزیک لایه های نازک"، دانشگاه پیام نور، تهران.

[18] R. W. Berry, P. M. Hall & M.T. Harris, 1968 , "**Thin film Technology**", , Van Nostrand Company.

[19] Chennupati. Jagadish, and Stephen. J. Pearton, (2006), "**Zinc oxide bulk.**" *Thin Films and Nanostructures*.

[20] Z. L. Wang, (2007), "**Novel nanostructures of ZnO for nanoscale photonics, optoelectronics, piezoelectricity, and sensing.**", *Applied Physics A*, 88(1), 7-15.

[21] S. W. Kim, S. Fujita, H. K. Park, B. Yang, H. K. Kim, and D. H. Yoon, (2006), "**Growth of ZnO nanostructures in a chemical vapor deposition process.**", *Journal of crystal growth*, 292(2), 306-310.

[22] S. Baruah, and J. Dutta, (2009), "**Hydrothermal growth of ZnO nanostructures.**", *Science and Technology of Advanced Materials*, 10(1), 013001.

[23] J. Li, S. Srinivasan, G. N. He, J. Y. Kang, S. T. Wu, and F. A. Ponce, (2008), "**Synthesis and luminescence properties of ZnO nanostructures produced by the sol-gel method.**", *Journal of Crystal Growth* 310(3), 599-603.

[24] J. H. Park, Y.J. Choi, and J. G. Park, (2005), "**Synthesis of ZnO nanowires and nanosheets by an O₂-assisted carbothermal reduction process.**", *Journal of Crystal Growth*, 280(1), 161-167.

[25] A. A. Scalisi, R. G. Toro, G. Malandrino, M. E. Fragala, and G. Pezzotti, (2008) "**Growth of ZnO nanostructures produced by MOCVD: a study of the effect of the substrate.**", , *Chemical Vapor Deposition*, 14(5-6), 115-122.

[26] Dedova, T., M. Krunk, M. Grossberg, O. Volobujeva, and I. Oja Acik, (2007), "**A novel deposition method to grow ZnO nanorods: Spray pyrolysis.**", *Superlattices and Microstructures*, 42(1), 444-450.

- [27] S. J. Pearton, D. P. Norton, K. Ip, Y. W. Heo, and T. Steiner, (2005), "**Recent progress in processing and properties of ZnO.**", *Progress in materials science*, 50(3), 293-340.
- [28] L. Armelao, D. Barreca, M. Bertapelle, G. Bottaro, C. Sada, and E. Tondello, (2003), "**A sol-gel approach to nanophasic copper oxide thin films.**", *Thin Solid Films*, 442(1), 48-52.
- [29] D. Chauhan, V. R. Satsangi, S. Dass, and R. Shrivastav, (2006), "**Preparation and characterization of nanostructured CuO thin films for photoelectrochemical splitting of water.**", *Bulletin of Materials Science*, 29(7), 709.
- [30] I. A. Ezenwa, (2012), "**Optical Analysis of Chemical bath Fabricated CuO Thin Films.**", *Research Journal of Recent Sciences*, 1(1), 46-50.
- [31] J. Y. Park., T. H. Kwon, S. W. Koh, and Y. C. Kang, (2011), "**Annealing temperature dependence on the physicochemical properties of copper oxide thin films.**", *Bull. Korean Chem. Soc*, 32(4), 1331-1335.
- [32] M. K. Song, S. Park, F. M. Alamgir, J. Cho, and M. Liu, (2011), "**Nanostructured electrodes for lithium-ion and lithium-air batteries: the latest developments, challenges, and perspectives.**", *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 72(11), 203-252.
- [33] V. V. Kislyuk, and O. P. Dimitriev, (2008), "**Nanorods and nanotubes for solar cells.**", *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 8(1), 131-148.
- [34] F. Mumm, A. T. J. V. Helvoort, and P. Sikorski, (2009), "**Easy route to superhydrophobic copper-based wire-guided droplet microfluidic systems.**", *Acs Nano*, 3(9), 2647-2652.
- [35] K. J. Choi, and H. W. Jang, (2010), "**One-dimensional oxide nanostructures as gas-sensing materials: review and issues.**", *Sensors*, 10(4), 4083-4099.

- [36] L. P. Zhou, B. X. Wang, X. F. Peng, X. Z. Du, and Y. P. Yang, (2010), "**On the Specific Heat Capacity of CuO Nanofluid.**", *Advances in Mechanical Engineering*.
- [37] S. B. Wang, C. H. Hsiao, S. J. Chang, K. T. Lam, K. H. Wen, S. C. Hung, S. J. Young, and B. R. Huang, (2011), "**A CuO nanowire infrared photodetector.**", *Sensors and Actuators A: Physical*, 171 (2), 207-211.
- [38] X. Zhang, W. Shi, J. Zhu, D. J. Kharistal, W. Zhao, B. S. Lalia, H. H. Hng, and Q. Yan, (2011), "**High-power and high-energy-density flexible pseudocapacitor electrodes made from porous CuO nanobelts and single-walled carbon nanotubes.**", *ACS nano*, 5(3), 2013-2019.
- [39] J. Liu, J. Jin, Z. Deng, S. Z. Huang, Z. Y. Hu, L. Wang, C. Wang et al, (2012), "**Tailoring CuO nanostructures for enhanced photocatalytic property.**", *Journal of colloid and interface science*, 384(1), 1-9.
- [40] R. V. Kumar, Y. Diamant, and A. Gedanken, (2000), "**Sonochemical synthesis and characterization of nanometer-size transition metal oxides from metal acetates.**", *Chemistry of Materials* 12(8), 2301-2305.
- [41] J. Mizusaki, J. Tabuchi, T. Matsuura, S. Yamauchi, and K. Fueki, (1989), "**Electrical Conductivity and Seebeck Coefficient of Nonstoichiometric $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$.**", *Journal of The Electrochemical Society*, 136(7), 2082-2088.
- [42] B. Yang, S. Aggarwal, A. M. Dhote, T. K. Song, R. Ramesh, and J. S. Lee, (1997), " **$\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3/\text{Pb}(\text{Nb}_{0.04}\text{Zr}_{0.28}\text{Ti}_{0.68})\text{O}_3/\text{La}_{0.5}\text{Sr}_{0.5}\text{CoO}_3$ thin film heterostructures on Si using TiN/Pt conducting barrier.**", *Applied physics letters*, 71(3), 356-358.
- [43] J. J. Liangg, and Hung-Shan Weng, (1993), "**Catalytic properties of lanthanum strontium transition metal oxides ($\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{BO}_3$; B= manganese, iron, cobalt, nickel) for toluene oxidation.**", *Industrial & engineering chemistry research*, 32, no. 11, 2563-2572.

[44] S. Zhang, Ning Han, and Xiaoyao Tan, (2015), "**Density functional theory calculations of atomic, electronic and thermodynamic properties of cubic LaCoO_3 and $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_3$ surfaces.**", *RSC Advances* 5, no. 1, 760-769.

[45] K. Daoudi, T. Tsuchiya, T. Nakajima, A. Fouzri, and M. Oueslati, (2010), "**Epitaxial growth of $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ thin films on SrTiO_3 substrates by metal-organic deposition.**", *Journal of Alloys and Compounds* 506, no. 2, 483-487.

[46] Kais. Daoudi, Zied Othmen, Saoussen El Helali, Meherzi Oueslati, and Tetsuo Tsuchiya. "**Metal-Organic Deposition of Epitaxial $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ Thin Films on LaAlO_3 Substrates.**", (2015), *Crystal Structure Theory and Applications* 4, no. 01, 1.

[47] G. Prokhorov, , G. G. Kaminsky, I. I. Kravchenko, and Y. P. Lee, (2002), "**Transport properties of $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CoO}_{3-\delta}$ films ($0.15 \leq x \leq 0.5$).**", *Physica B: Condensed Matter* 324, no. 1, 205-216.

[48] J. S. Shaikh, R. C. Pawar, R. S. Devan, Y. R. Ma, P. P. Salvi, S. S. Kolekar, and P. S. Patil, (2011), "**Synthesis and characterization of Ru doped CuO thin films for supercapacitor based on Bronsted acidic ionic liquid.**", *Electrochimica Acta* 56, no. 5, 2127-2134.

[49] B. Saha, N. S. Das, and K. K. Chattopadhyay, (2014), "**Combined effect of oxygen deficient point defects and Ni doping in radio frequency magnetron sputtering deposited ZnO thin films.**", *Thin Solid Films* 562 37-42.

[50] P. Sagar, M. Kumar, and R. M. Mehra, (2008), "**The Meyer-Neldel rule in sol-gel derived polycrystalline ZnO: Al thin films.**", *Solid State Communications*, 147, no. 11, 465-469.

[۵۱] محمد یونسی، آرش پاکدل، ۱۳۸۸، "اثر آلایش کم نیکل بر روی خواص نوری و ساختاری نانو لایه‌های اکسید روی"، کنفرانس انجمن اپتیک و فوتونیک / ایران، دوره ۱۶.

- [52] T. Wakano, N. Fujimura, Y. Morinaga, N. Abe, A. Ashida, T. Ito, (2001), "**Magnetic and magneto-transport properties of ZnO:Ni films**", *Phys. E.* 10, 260.
- [53] S. K. Patil, S. S. Shinde, and K. Y. Rajpure, (2013), "**Physical properties of spray deposited Ni-doped zinc oxide thin films.**", *Ceramics International* 39, no. 4, 3901-3907.

Abstract

Studying the electrical properties play important role in experimental and theoretical investigations of thin film materials. Temperature dependence of electrical conductivity is an important parameter of electrical properties of thin film samples that can be used not only to find the conduction processes in a sample but also the details of impurities levels, including the position and density of levels within the band gap. In this research work we have tried to investigate theoretically the electrical conductivity of thin layers of strontium lanthanum cobalt oxide $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$ (LSCO), copper oxide doped with ruthenium (CuO:Ru) and zinc oxide doped with nickel (ZnO:Ni) using Mott variable range hopping (MVRH) and Arrhenius thermal activation.

In LSCO samples, we found using MVRH, Mott characteristic temperature (T_M) is in the range of 2.8×10^5 - 5×10^6 K, the density of states at the Fermi level ($N(E_f)$) is 8.3×10^{44} - $2.0 \times 10^{46} (\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})$, the average hopping energy (W_{hop}) 14-77 meV, the average hopping distance (R_{hop}) 1.4- 4.0 nm. In the sample with higher conductivity using thermal activation mechanism the Arrhenius activation energy (E_a) was found to be 8-19 meV in the temperature range of study.

In CuO:Ru samples, using MVRH mechanism we found, T_M is about 1×10^5 - 1.6×10^6 K, $N(E_f) \sim 1.8 \times 10^{47}$ - $9.3 \times 10^{48} (\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})$, $W_{\text{hop}} \sim 29$ - 69 meV, $R_{\text{hop}} \sim 0.3$ - 0.5 nm and $E_a \sim 72$ - 75 meV in the range of studied temperature.

In ZnO:Ni samples, using MVRH mechanism we found, T_M is about 1.2×10^6 - 1.7×10^7 K, $N(E_f) \sim 6.0 \times 10^{42}$ - $1.4 \times 10^{44} (\text{J}^{-1} \cdot \text{m}^{-3})$, $W_{\text{hop}} \sim 51$ - 112 meV, $R_{\text{hop}} \sim 5.7$ - 11.6 nm and $E_a \sim 135$ - 260 meV in the range of studied temperature.

Keywords: electrical properties, electrical conductivity, thin film semiconductor, $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{CoO}_3$, CuO:Ru, ZnO:Ni.



Shahrood University of Technology

Faculty of Physics

**A theoretical investigation on physical
properties of metal-oxide thin film semiconductors**

Halimeh Choramin

Supervision:

Professor. Hosein Eshghi

February 2016